

А. И. Огородников

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ**

Министерство образования и науки Российской Федерации

Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

А. И. Огородников

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

Учебное пособие

Научный редактор доц., канд.техн.наук И.Н.Тихонов

*Екатеринбург
УрФУ
2011*

УДК 537.5 (075.8)
ББК 22.33я73
О-39

Рецензенты:

кафедра технологии машиностроения и методики
профессионального обучения Машиностроительного института
Российского государственного профессионально-педагогического
университета (зав. кафедрой – доц., канд.техн.наук, Н.В.Бородина);

главный научный сотрудник Института химиии твердого тела УрО
РАН, проф., д-р. хим. наук М.В.Кузнецов

Огородников А. И.

О-39 ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ: учебное
пособие / А.И. Огородников. Екатеринбург: УрФУ, 2011. 105 с.

ISBN 978-5-321-01917-7

Пособие по курсу «Физические основы электронной техники» предназначено для студентов механико-машиностроительного факультета, обучающихся по специальности «Электронное машиностроение». Основной целью пособия является формирование у студентов теоретического представления об основных закономерностях и физических процессах, происходящих в полупроводниках и диэлектриках и других элементах современной электронной техники.

Библиогр.: 11 назв. Рис. 70.

УДК 537.5 (075.8)
ББК 22.33я73

ISBN 978-5-321-01917-7

© УрФУ, 2011
© Огородников А. И., 2010

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое пособие основано на односеместровом курсе лекций, читаемых в течение многих лет в Уральском федеральном университете для студентов механико-машиностроительного факультета, специализирующихся в области электронного машиностроения, может быть полезно и для студентов других родственных специальностей. В пособии рассмотрены строение кристаллов, зонная теория твердого тела, распределение электронов по энергетическим уровням, положение уровней Ферми в разных материалах, а также дано представление о понятиях проводимости и сверхпроводимости.

В данное пособие включен лишь ограниченный круг вопросов, выбор и глубина которых продиктованы в первую очередь требованиями государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования по направлению 210107 – Электронное машиностроение.

Следует отметить, что одного готового учебника по данному курсу не существует как такового, поэтому данное издание может быть полезно всем студентам, изучающим подобные дисциплины.

ТЕМА 1. Кристаллическая решетка

1.1. Равновесное расположение частиц в кристаллах

Для того чтобы понять, что такое кристаллическая решетка, рассмотрим, как взаимодействуют между собой частицы, составляющие эту самую кристаллическую решетку.

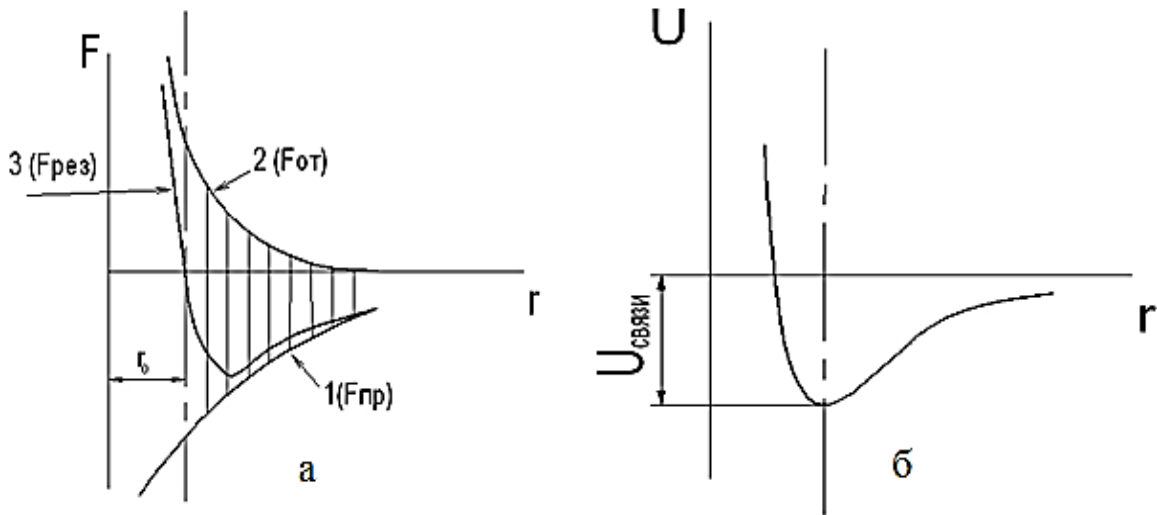


Рис. 1.1. Зависимость силы взаимодействия двух частиц (а) и энергии взаимодействия (б) от расстояния между частицами

При достаточном сближении частиц между ними возникают силы взаимодействия. Независимо от природы сил взаимодействия характер их проявления можно выразить следующим образом (рис. 1.1, а). На относительно больших расстояниях возникают силы притяжения $F_{\text{пр}}$, возрастающие при уменьшении расстояния между частицами (кривая 1).

На небольших расстояниях возникают и резко возрастают силы отталкивания при сближении частиц, причем $F_{\text{от}}$ при определенных расстояниях превосходят $F_{\text{пр}}$, так как растут быстрее (кривая 2 круче). Силы отталкивания действуют между молекулами на очень малых расстояниях, когда приходят в соприкосновение заполненные электронные оболочки атомов, входящих в состав молекул. Существующий в квантовой механике принцип Паули запрещает проникновение заполненных электронных оболочек друг в друга.

При $r = r_0$, сила $\vec{F}_{\text{рез}} = \vec{F}_{\text{пр}} + \vec{F}_{\text{от}}$, а энергия взаимодействия U достигает минимального значения, равного $U_{\text{св}}$, (рис. 1.1, б). Такое состояние является состоянием устойчивого равновесия: $F_{\text{пр}} = F_{\text{от}}$, $U = U_{\text{св}}$,

т.е. предоставленные сами себе частицы будут выстраиваться в строгом порядке на расстоянии r_0 друг от друга, образуя кристалл – тело с правильной внутренней структурой. *Энергия связи* – это количество энергии, которую надо сообщить телу, находящемуся при абсолютном нуле для перевода его в газообразную фазу.

Внутреннюю структуру кристалла характеризует тип кристаллической решетки. Различают трансляционные решетки Бравэ и решетки с базисом.

1.2. Трансляционная решетка Бравэ

Правильное периодически повторяющееся размещение частиц в кристалле можно описать с помощью операции параллельного перемещения (трансляции).

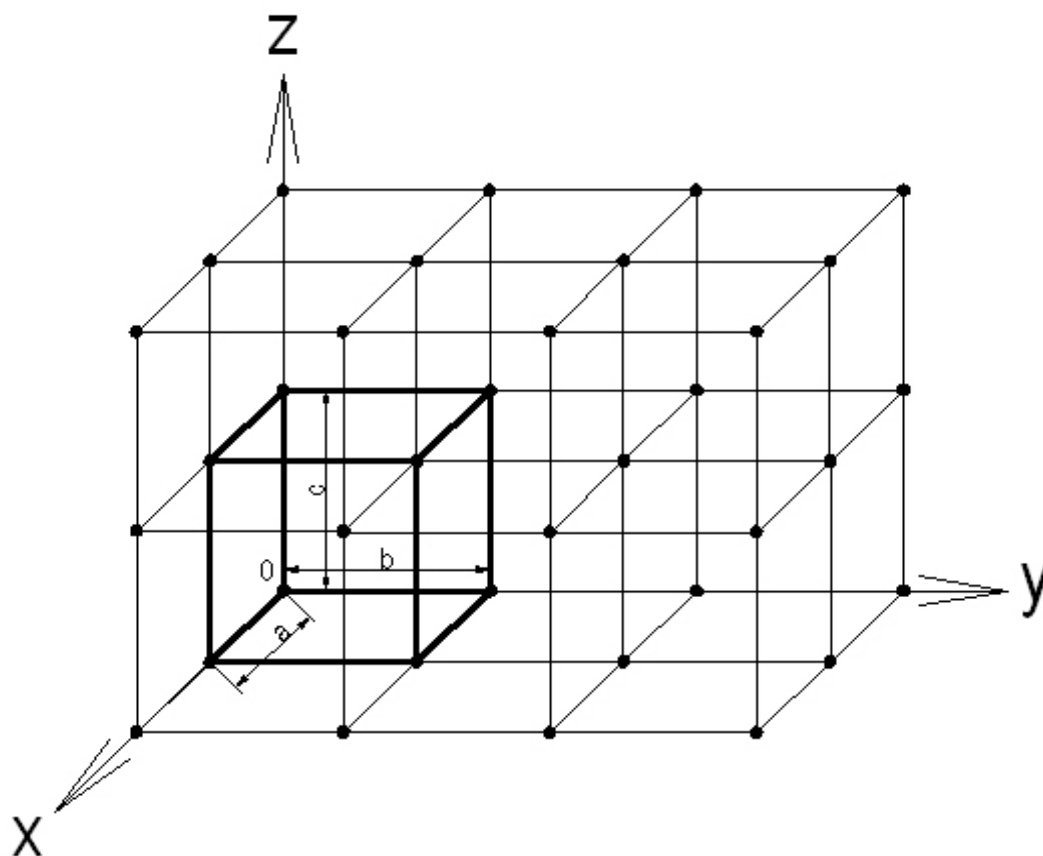


Рис. 1.2. Решетка, полученная путем трансляции вдоль основных осей координат

На рис. 1.2 представлена решетка, полученная путем трансляции частицы вдоль трёх осей:

- по оси OX на отрезки $a, 2a, \dots, ma$,
- по оси OY на отрезки $b, 2b, \dots, nb$,
- по оси OZ на отрезки $c, 2c, \dots, pc$,

где m, n, p – целые числа.

Положение любой частицы в такой решетке определяется вектором:

$$\vec{r} = m \cdot \vec{a} + n \cdot \vec{b} + p \cdot \vec{c}. \quad (1.1)$$

Векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ называют наименьшими *векторами трансляции*, а их величину – *периодом трансляции*.

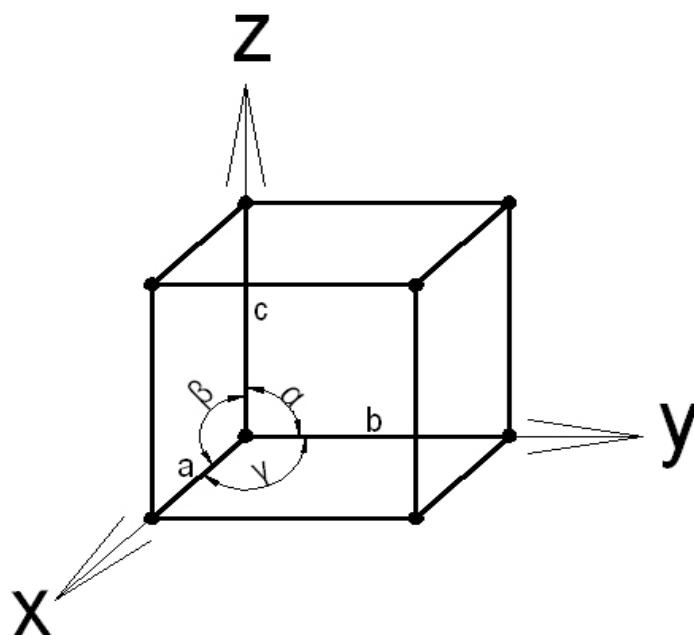


Рис. 1.3. Элементарная ячейка трансляционной решетки

Наименьший параллелепипед, построенный на векторах $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, называется *элементарной ячейкой кристалла* (рис. 1.3).

Все элементарные ячейки кристалла имеют одинаковую форму и объем, во всех *вершинах ячеек* располагаются одинаковые атомы или группы атомов. Поэтому все вершины ячеек эквивалентны друг другу. Их называют *узлами решетки*.

Для характеристики элементарной ячейки необходимо в общем случае задать 6 величин: 3 ребра ячейки (a, b, c) и 3 угла между ними (α, β, γ). Эти величины называются параметрами элементарной ячейки.

Элементарные ячейки, содержащие атомы только в вершинах, называются *простыми* или *примитивными*. Элементарная ячейка может содержать один или более атомов. Если она содержит только один атом,

мы помещаем его в узел решетки, такая решетка называется *решеткой Бравэ*.

Элементарная ячейка, имеющая несколько атомов, называется *решеткой с базисом*.

Элементарные ячейки, имеющие частицы не только в узлах (вершинах), но и в других точках, называются *сложными*. Наиболее распространенными из них являются объемноцентрированные (ОЦ) и гранецентрированные (ГЦ), а также базоцентрированные (БЦ). Все они являются решетками Бравэ.

1.3. Обозначение узлов, направлений и плоскостей в кристалле

Положение любого узла решетки определяется координатами x, y, z (рис. 1.4). Эти координаты можно выразить через параметры решетки a, b, c :

$$X = m \cdot a,$$

$$Y = n \cdot b,$$

$$Z = p \cdot c.$$

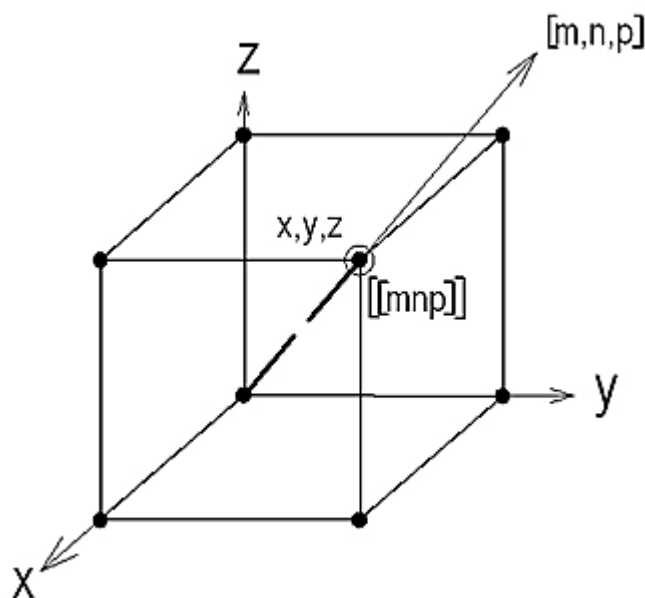


Рис. 1.4. Индексы узлов и направлений (индексы Миллера)

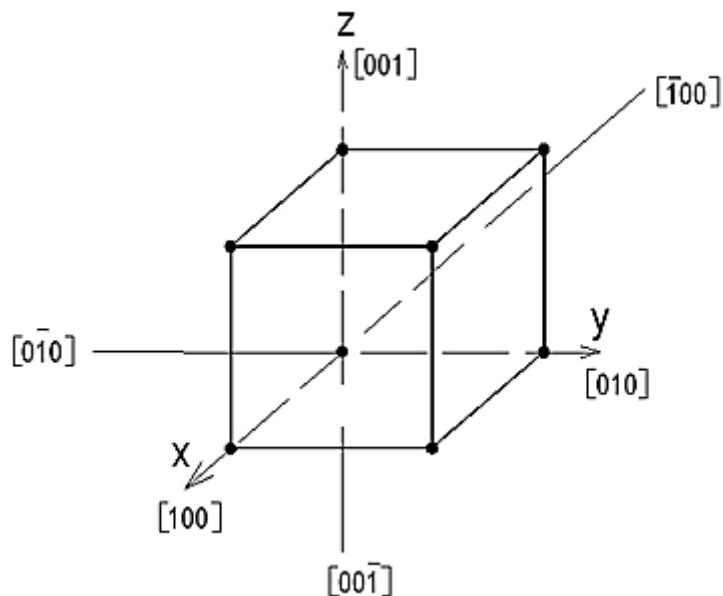


Рис. 1.5. Индексы направлений кубической решетки

Если за единицы измерения расстояния (длин) принять параметры решетки, то координатами узла будут числа m, n, p . Эти числа называются индексами узла и записываются так: $[[m, n, p]]$.

Физические свойства кристаллов зависят от направлений осей. Поэтому при измерении этих свойств необходимо знать, вдоль каких осей измеряются свойства. Для определения направления служат индексы направлений.

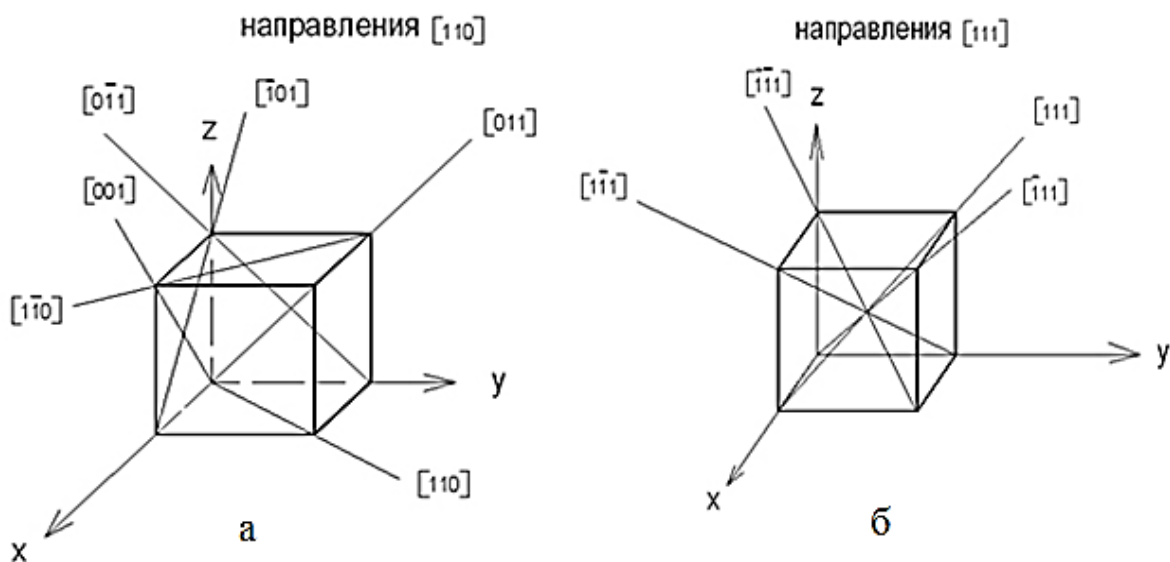


Рис. 1.6. Индексы основных направлений в кубической решетке для $[110]$ (а) и $[111]$ (б)

Для описания направления в кристалле выбирается прямая, проходящая через начало координат. Ее направление однозначно определяется индексами первого узла $[[m, n, p]]$, через который она проходит (рис. 1.5). Поэтому индексы узла одновременно являются и индексами направления. Они обозначаются $[m, n, p]$.

На рис. 1.6 (а, б) показаны все возможные варианты индексов для семейств направлений $[110]$ и $[111]$.

Индексы плоскостей описываются следующим образом. Берут отрезки А, В, С, выраженные в осевых единицах и отсекаемые плоскостью на осях решетки, и записывают обратные величины этих отрезков $1/A$, $1/B$, $1/C$. Полученные дроби приводят к общему знаменателю.

Пусть D является общим знаменателем вышеперечисленных дробей, тогда целые числа $h = \frac{D}{A}$, $k = \frac{D}{B}$, $l = \frac{D}{C}$ и будут индексами плоскости, записываемыми в круглых скобках (h, k, l).

На рис. 1.7 показаны индексы плоскостей кубической решетки. В кубической решетке индексы плоскостей совпадают с индексами направлений нормали к плоскости.

Именно простота и понятность такой системы индексирования плоскостей и направлений в кристаллах и обусловила её популярность и распространённость.

Таким образом, символ любой грани кристалла записывается в виде совокупности нескольких *индексов Миллера*:

1. В символе грани, параллельной какой-либо кристаллографической оси, индекс, соответствующей этой оси, равен нулю.
2. Совокупность индексов Миллера характеризует отношения каждой грани к осям. Так, индекс h – к оси X, k – к оси Y, l – к оси Z. Например, индексы (111) указывают, что единичная грань пересекает все три кристаллографические оси.
3. Поскольку грани кристалла могут располагаться по обе стороны от начала координат, то индексам Миллера (h, k, l), не равным нулю, можно приписывать знак минус.

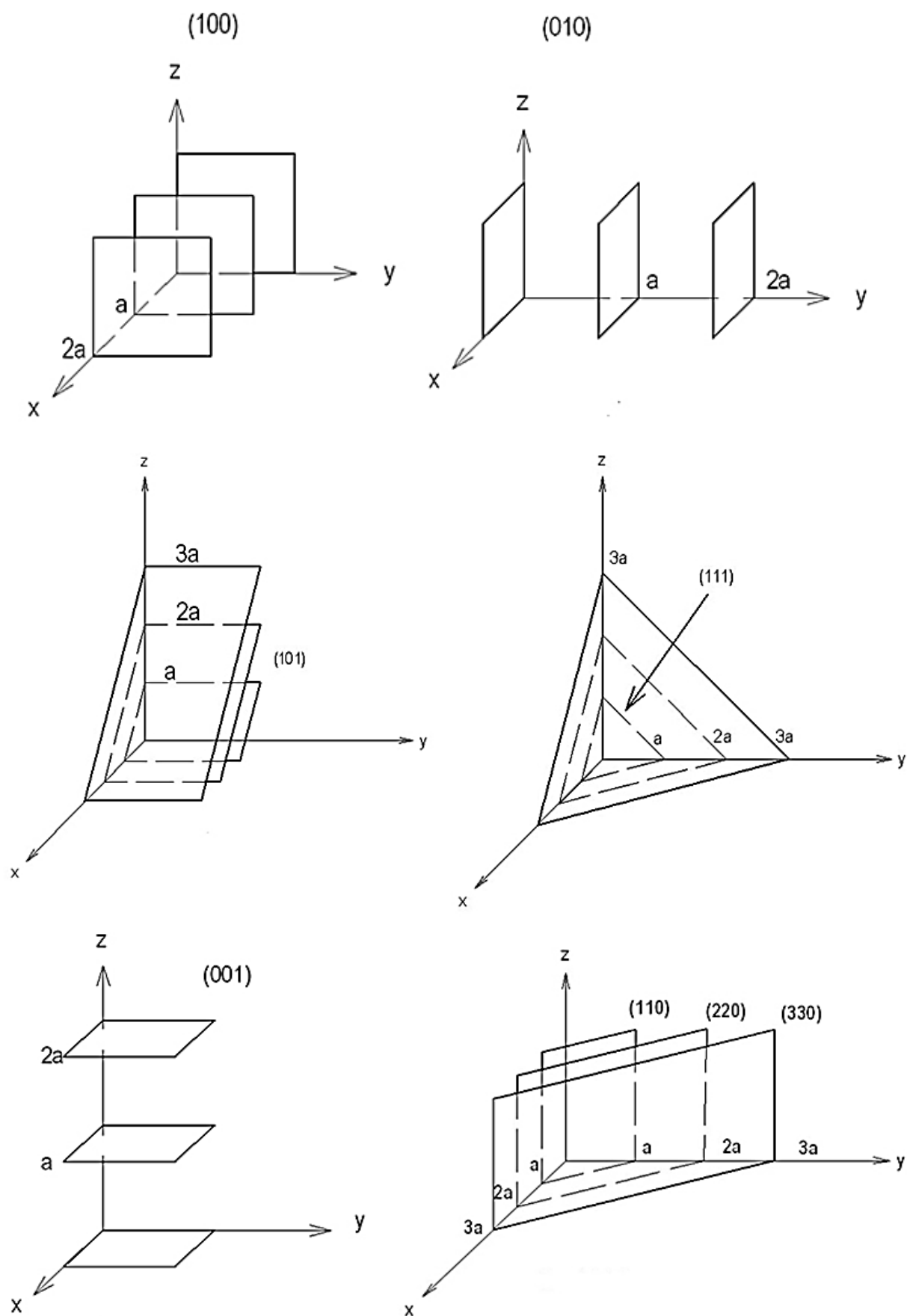


Рис. 1.7. Индексы осевых плоскостей в кубической решетке

ТЕМА 2. Классификация кристаллов по типу связей

Все кристаллы в природе делятся на четыре вида (рис. 2.1):

1. *Ионные кристаллы* (NaCl, KCl, NiCl, оксиды, сульфиды, нитриды, карбиды). В узлах решетки находятся положительные и отрицательные ионы.
2. *Атомные кристаллы* (алмаз, кремний, германий и др.). В узлах решетки находятся атомы, связь ковалентная.
3. *Металлические кристаллы*. В узлах положительно заряженные ионы. Металлическая связь.
4. *Молекулярные кристаллы* (твердые кислород, водород, йод и др.). В узлах – молекулы, связь Ван-дер-Ваальса.

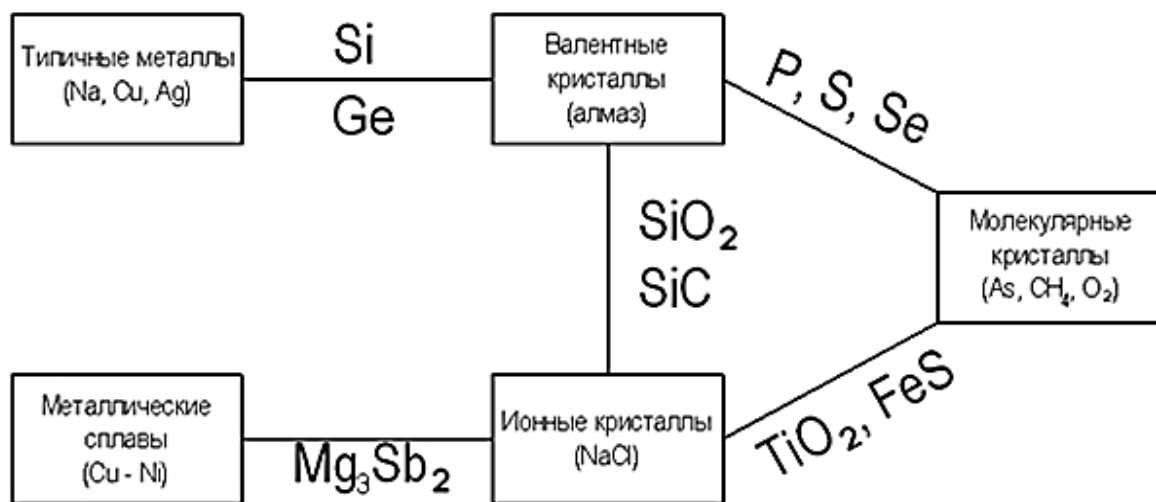


Рис. 2.1. Схема классификации кристаллов по типам межатомных связей

2.1. Ионные кристаллы

У щелочных и щелочно-земельных металлов на внешнем уровне находятся валентные электроны, которые слабо связаны с ядром. В то же время у галогенов не хватает одного электрона для заполнения внешнего уровня, причем галогены обладают высоким сродством к электрону. Атом Me отдает электрон атому галогена, при этом ион Me приобретает заряд (+), а ион галогена – (-). Ионы взаимодействуют между собой по закону Кулона – связь «ионная», или «гетерополярная». Энергия связи колеблется от сотен до тысяч ккал/моль (электростатическое взаимодействие).

Свойства ионных кристаллов:

1. Имеют значительную прочность и твердость.
2. Высокую $t_{пл}$ и теплоту сублимации.
3. Многие прозрачны в широком диапазоне длин волн.
4. Хорошо растворимы в воде.
5. Диссоциируют на ионы.
6. Электропроводность имеет ионную природу, резко зависит от температуры.
7. Силы взаимодействия между ионами в кристалле имеют сферический характер, что позволяет оценивать радиусы ионов.

Например, в решетке NaCl $R_{Na^+} = 0,98 \text{ \AA}$, $R_{Cl^-} = 1,81 \text{ \AA}$.

	координационное число			r_k / r_a
гантель			2	$< 0,15$
треугольник			3	$0,15 \dots 0,22$
тетраэдр			4	$0,22 \dots 0,41$
октаэдр			6	$0,41 \dots 0,73$
ОЦК			8	$0,73 \dots 1$
кубооктаэдр			12	> 1

Рис. 2.2. Значения координационных чисел для простейших решеток

В природе структуры стремятся к плотному расположению ионов. Плотность упаковки характеризуется *координационным числом*, которое определяет число ближайших соседей того или иного структурного элемента (рис. 2.2). В атомном кристалле (решетке) координационное число равно числу ближайших атомов, окружающих данный атом; в ионном кристалле (решетке) координационное число указывает количество ионов противоположного знака, окружающих данный ион.

Координационное число может быть равно 2, 3, 4, 6, 8, 12; чем выше число – тем больше плотность упаковки, причем координационное число существенно зависит от соотношения радиусов катиона и аниона.

2.2. Атомные кристаллы

Атомные кристаллы создаются при наличии между атомами гомеополярных, или ковалентных, связей. Ковалентная связь осуществляется в результате обобществления электронной плотности взаимодействующих атомов в пространстве между их ядрами. Необходимое условие образования ковалентной связи состоит в перекрывании исходных атомных волновых функций, что приводит к увеличению притяжения электронов к ядрам и тем самым к уменьшению полной энергии системы.

Если ковалентная связь осуществляется между двумя одинаковыми ядрами, то распределение электронной плотности симметрично относительно этих ядер – *ковалентная связь неполярная* (нет дипольного момента).

Если же между двумя разными атомами, то электронное облако смещено к одному из ядер, и такая *ковалентная связь* называется *полярной* (есть дипольный момент).

Ионная связь – предельный случай полярной связи, когда электронные облака взаимодействующих атомов настолько разделены, что образуются соответственно катионы и анионы.

Например, элементарным примером гомеополярной связи является связь атомов в молекуле H_2 (рис. 2.3). Каждый атом состоит из ядра и $1e$, вращающегося вокруг ядра. В молекуле же $2e$ образуют общую электронную пару и участвуют в совместном движении вокруг обоих ядер.

Получается, что e притягиваются обоими ядрами и в то же время как бы центрируют их в общей молекуле.

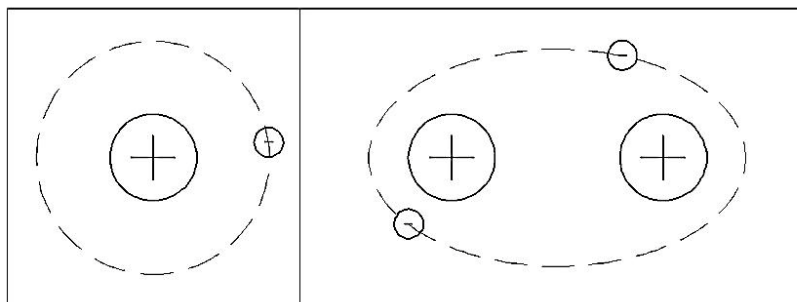


Рис. 2.3. Ковалентная связь в молекуле H_2

В сложных молекулах гомеополярная связь осуществляется валентными электронами, образующими несколько электронных пар.

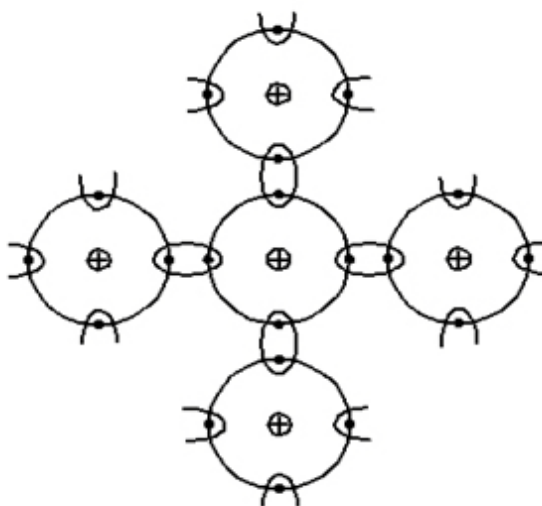


Рис. 2.4. Образование ковалентной связи в кристалле алмаза путем попарного обобществления электронов данного атома с ближайшими соседями

Характерным примером валентной гомеополярной связи является связь в кристалле алмаза. Атомы углерода имеют 4 валентных e ($2e$ на уровне $2s$ и $2e$ на $2p$), однако для образования устойчивой 8 электронной конфигурации не хватает еще $4e$. Недостающие $4e$ появляются при обмене (попарном обобществлении) электронами с четырьмя ближайшими соседними атомами, сопровождающемся перераспределением электронной плотности (рис. 2.4). Гомеополярная связь обладает направленностью и обуславливает направленную валентность, которая выражается в том, что

силы связи ориентируются вдоль кристаллографических направлений и атомы образуют весьма прочную решетку.

Свойства атомных кристаллов:

1. Большая твердость.
2. Высокая температура плавления $t_{пл}$.
3. Большая теплота испарения.
4. Прозрачность в длинноволновой части спектра.
5. Диэлектрики.
6. Полупроводники.

2.3. Металлические кристаллы

Металлические кристаллы образованы из положительных ионов, находящихся в узлах решетки. Свободные электроны, находящиеся в Ме, образуют своеобразное электронное облако, цементирующее положительно заряженные ионы, и в то же время не могут сами выйти за пределы решетки. Большинство Ме имеют *координационное число* 12, т.е. наиболее плотную упаковку: Be, Mg, Ca, V, La, Ti, Zn, Cd, Hg, Ga, In, Pb, Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt, Th, U.

Металлы с координационным числом 8: Li, K, Na, Fe, Mo, Nb, Ta, Or, W. Входящие в состав решетки катионы совершенно идентичны, а металлическая связь не имеет направленности действия. Свойства металлических кристаллов:

1. Высокая теплопроводность.
2. Высокая электропроводность (обусловленная наличием свободных электронов).
3. Высокая пластичность (обусловленная характером связи, позволяющей смещаться без разрушения одной части решетки относительно другой на значительные расстояния).
4. Ме непрозрачны, имеют высокую отражательную способность (обусловлено наличием свободных электронов).

2.4. Молекулярные кристаллы

Молекулярные кристаллы образованы из молекул, связанных силами Ван-дер-Ваальса, имеющими электрическую природу и возникающими

между электрически нейтральными атомами и молекулами. Получается, что внутри молекул действуют ковалентные силы, а между молекулами – вандерваальсовские. Силы Ван-дер-Ваальса обусловлены незначительной асимметрией e в молекуле.

К веществам с молекулярной кристаллической решеткой относятся лед, природная сера, Ar, O₂, CH₄ и другие органические соединения.

Силы Ван-дер-Ваальса очень слабы (с энергией порядка 10-15 кДж/моль). Свойства молекулярных кристаллов:

1. Отличаются малой твердостью.
2. Сравнительно низкой $t_{пл}$ и кипения.
3. Многие кристаллы прозрачны для электромагнитного излучения вплоть до ультрафиолетовой области спектра.
4. В электрическом отношении – изоляторы.

Реальные кристаллы, как правило, образованы при наличии нескольких типов связей, но одна из них имеет доминирующее значение, определяя структуру и свойства.

Например:

SiO₂ и SiO – ионно-ковалентная связь,

TiO₂ и FeS – ионно-молекулярная связь,

P, S, Se – ковалентно-молекулярная связь,

Si, Ge – металло-ковалентная связь,

Mg₃ Sb₂ – металло-ионная связь.

Все кристаллические структуры, в отличие от аморфных, анизотропны, т.е. некоторые физические свойства зависят от направлений.

Все кристаллографические тела, имеющие определенный химический состав переходят в жидкое состояние при строго определенной температуре и давлении. Свойства кристалла (твердость, растворимость, $t_{пл}$ и др.) зависят от энергии связи.

ТЕМА 3. Дефекты в реальных кристаллах

В отличие от идеальных, имеющих правильную строго периодическую структуру, реальные кристаллы содержат большое количество дефектов, оказывающих влияние на все их свойства – механические, электрические, оптические и др. Дефекты подразделяют:

- 1) на точечные;
- 2) линейные;
- 3) поверхностные.

3.1. Точечные дефекты

1. Атомные,
2. Электронные,
3. Энергетические.

К *атомным* дефектам относят *вакансии*, *атомы в междоузлиях* и *примеси*.

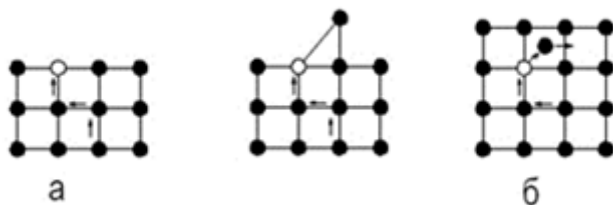


Рис. 3.1. Вакансия (а), атом в междоузлии (б)

Вакансии возникают при удалении из решетки собственного атома. Часто они являются природными дефектами, но могут вызываться и искусственно. В частности, они образуются при испарении поверхностных атомов и диффузии возникающих пустых узлов решетки внутри кристалла. Такие дефекты называются дефектом по Шоттки (рис. 3.1, а).

Концентрация дефектов Шоттки может быть рассчитана по формуле

$$N_{\text{ш}} = N_0 \cdot e^{-\frac{\Delta W_0}{kT}}, \quad (3.1)$$

где k – постоянная Больцмана; ΔW_0 – энергия образования вакансии.

Атомы в междоузлии. Причиной таких дефектов является тепловое движение. Колеблющиеся вокруг узлов решетки атомы имеют различные скорости от чрезвычайно малых до очень больших, т.е. в кристалле могут присутствовать атомы, имеющие кинетическую энергию ниже средней и

выше средней. Атомы, имеющие высокую кинетическую энергию, могут срываться со своих устойчивых равновесных мест и перемещаться в объеме кристалла, отдавая значительную часть энергии решетке. Если поблизости окажется вакансия, то она будет заполнена, если же нет вакансии, то атом расположится где-нибудь в междоузлии. Атом назван Френкелем дислоцированным, а вид дефекта (пустой узел + дислоцированный атом) называется «дефектом по Френкелю» (рис. 3.1, б).

Концентрацию дефектов по Френкелю N_{Φ} можно определить по формуле

$$N_{\Phi} = \sqrt{N_0 \cdot N_M} \cdot e^{-\frac{\Delta W}{2kT}}, \quad (3.2)$$

где N_0 – число атомов в 1 см^3 кристалла; N_M – число междоузлий в том же объеме; ΔW – энергия дефектообразования для перевода атома из узла в междоузлие; k – постоянная Больцмана.

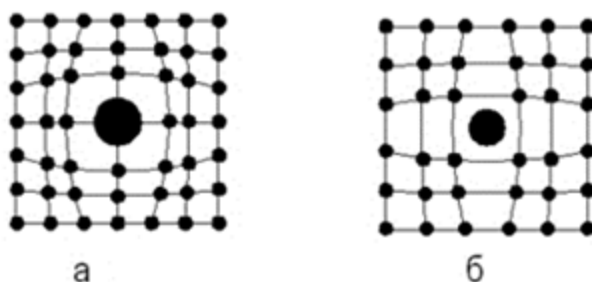


Рис. 3.2. Примесные атомы замещения (а) и внедрения (б)

Примеси могут замещать собственно атомы кристаллической решетки или внедрятся в междоузлия (рис. 3.2), образуя твердые растворы замещения и внедрения. В зависимости от природы примесных атомов они могут отдавать решетке или брать у нее электроны, проявляя донорные или же акцепторные свойства.

Электронными дефектами называются свободные электроны и дырки, возникающие при термическом возбуждении полупроводников и диэлектриков и обуславливающие их электропроводность.

Энергетические дефекты. Частицы (атомы или ионы), находящиеся в узлах кристаллической решетки, колеблются около своих равновесных положений с амплитудой 5-7% равновесного расстояния между соседними частицами. Из-за наличия сил связи эти колебания не являются локализованными, отклонения атомов от положения равновесия

сопровождается появлением движения соседних атомов, т.е. движение является коллективным в форме упругой волны.

Сложное колебание решетки можно представить как суперпозицию простых синусоидальных волн, распространяющихся по решетке и называемых *нормальными колебаниями*. Нормальные колебания имеют различные длины волны и направления смещений атомов, т.е. различные поляризации. *Полное число колебаний*, которые могут возникнуть в решетке равно $3N_0$ – числу степеней свободы кристалла ($3N_0$ – число частиц в кристалле).

Энергия нормальных колебаний может быть найдена по формуле

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \cdot \omega, \quad (3.3)$$

где n – целые числа 0, 1, 2,..., n ; ω – частота колебания;

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{6,6254 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{2 \cdot 3,14} = 1,0545 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ – приведенная постоянная Планка.

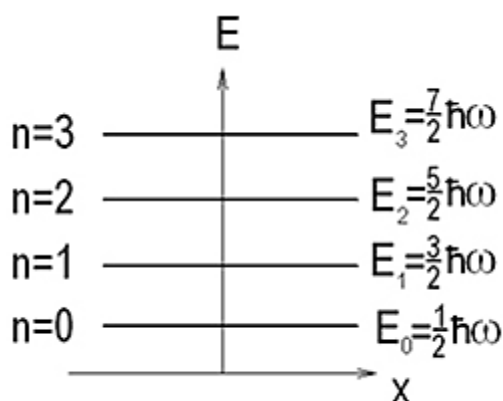


Рис. 3.3. Энергетический спектр нормальных колебаний решетки

Таким образом, энергетический спектр колебаний с частотой ω можно представить в виде рис. 3.3. Минимальное количество энергии, которое может поглотить или испустить решетка, соответствует переходу нормального колебания с данного энергетического уровня на ближайший соседний, т.е. $E_{\text{ф}} = \hbar \cdot \omega$.

Эта порция энергии тепловых колебаний называется *фононом*.

Фонон (от греческого phone – звук) – квант поля колебаний кристаллической решетки (по аналогии с квантом электромагнитного поля фотоном). Малые тепловые колебания взаимосвязанных структурных элементов кристалла (атомов, ионов, молекул) можно рассматривать как

совокупность распространяющихся в кристалле упругих волн с различными частотами ν и волновыми векторами \vec{K} . По квантовой теории каждой такой волне соответствует *совокупность квазичастиц – фононов*, имеющих энергии $\hbar * \nu$ и импульсы $\hbar * K$, где \hbar – постоянная Планка и $\hbar = \frac{h}{2*\pi}$, так как $\nu = \frac{\omega}{2*\pi}$.

Фотон (от греческого photos – свет) – квант поля электромагнитного излучения. По квантовой теории электромагнитные волны представляют собой поток элементарных частиц – фотонов, имеющих нулевую массу покоя и движущихся со скоростью света в вакууме. Энергия $E = h * \nu$, а импульс $p = \frac{h*\nu}{c}$, где c – скорость света. Свойства фотонов как частиц проявляются при их взаимодействии с другими частицами (явление Комптона, внешний фотоэффект).

Однако фононы, как квазичастицы, отличаются от частиц обычного типа (электронов, протонов и др.) тем, что они могут возникать и существовать лишь в какой-либо вещественной среде, где они выступают в качестве элементарных носителей движения, и не существуют в вакууме. При низких t возбуждения низкочастотные колебания, для которых $\hbar * \omega < K * T$, с повышением t средняя энергия возрастает и число фононов растёт.

Распространяющиеся в кристалле фононы рассеиваются на дефектах его структуры и на фононах. В свою очередь, тепловые колебания узлов (приводящие к существенным нарушениям строгой периодичности решетки) обуславливают один из важнейших механизмов рассеяния носителей тока в полупроводниковых кристаллах, так называемое решеточное рассеивание.

При $T \approx \theta = \frac{\hbar\omega_{max}}{K}$ возбуждаются даже самые высокочастотные колебания решетки. При $T > \theta$ среднее число фононов соответствующих частот возрастает пропорционально температуре.

Температура θ получила название температуры Дебая – температуры, при которой возбуждаются все моды колебаний в данном твёрдом теле. Дальнейшее увеличение температуры не приводит к появлению новых мод колебаний, а лишь ведёт к увеличению амплитуд уже существующих, т. е. средняя энергия колебаний с ростом температуры растёт. Температура Дебая — физическая константа вещества,

характеризующая многие свойства твёрдых тел — теплоёмкость, электропроводность, теплопроводность, уширение линий рентгеновских спектров, упругие свойства и т. п.

3.2. Линейные дефекты

Большой группой дефектов в кристаллах является совокупность линейных дефектов, так называемые *дислокации* (см. рис. 3.4):

- 1) краевая – по краю полуплоскости;
- 2) зернограничная – получается при расположении краевых дислокаций на равных интервалах;
- 3) спиральная (винтовая) дислокация.

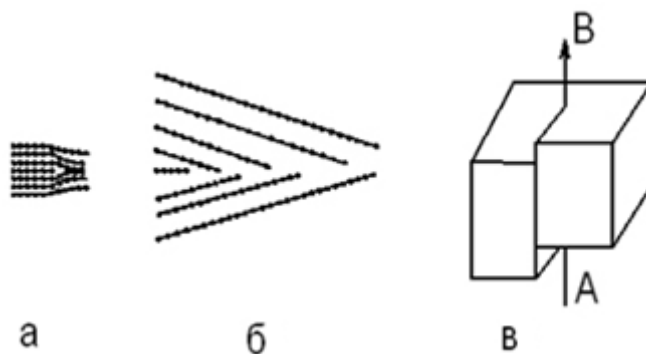


Рис. 3.4. Виды дислокаций: краевая (а), зернограничная (б) и винтовая (в)

В случае винтовой дислокации атомные плоскости не обрываются в кристалле, они непараллельны и замыкаются друг с другом, образуя как бы единую плоскость, изогнутую по винтовой линии. Шаг винтовой дислокации равен межплоскостному расстоянию.

Вектор, который надо провести, чтобы замкнуть концы контура, называется вектором сдвига или *вектором Бюргерса* (определяет шаг дислокации, направлен параллельно оси дислокации)

Дислокации появляются в процессе роста кристаллов, при их деформировании, при захлопывании полостей решетки, возникших вследствие слияния вакансий. Распределяются неравномерно, а их концентрация в кристаллах достигает больших величин порядка $10^8 - 10^9 \text{ см}^{-3}$.

Дислокации очень подвижны и легко взаимодействуют между собой и с дефектами решетки. Примесные атомы обычно накапливаются у

дислокаций, образуя *облака Котрелла*, которые, в свою очередь, препятствуют взаимодействию дислокаций с междоузельными атомами.

Дислокации оказывают существенное влияние на плотность кристалла, внутреннее трение и уменьшают значения упругих модулей.

При низких t дислокации могут оказывать существенное влияние на концентрацию и подвижность равновесных носителей и время жизни неравновесных носителей.

3.3. Поверхностные дефекты

К поверхностным дефектам относятся *границы между зёрнами, границы двойников, свободные поверхности кристалла* и др.

Граница кристалла является естественным нарушением периодичности потенциала кристаллической решетки. Обрыв кристаллической решетки приводит к появлению новых электронных состояний, волновые функции которых затухают по мере удаления от поверхности в объем кристалла. Кроме этого, причиной появления поверхностных электронных состояний может быть наличие некомпенсированных валентных связей у поверхностных атомов (так называемые *уровни Шокли*), а также отклонение потенциала от периодичности у поверхности кристалла, вызванное адсорбированными молекулами или атомами.

Заряд, заполняющий поверхностные электронные состояния, приводит к возникновению электрического поля, которое и является ответственным за многочисленные поверхностно-чувствительные эффекты.

Если два разориентированных участка монокристалла идентичны, но соединены между собой так, что граница между блоками представляет зеркальную плоскость симметрии, то эти блоки образуют двойник.

Характерные особенности блочной структуры оказывают решающее влияние на электрические, механические и другие свойства поликристалла.

ТЕМА 4. Зонная теория твердого тела

4.1. Энергетические уровни свободных атомов

Зонная теория твёрдого тела — квантово-механическая теория движения электронов в твёрдом теле.

В соответствии с квантовой механикой свободные электроны могут иметь любую энергию — их энергетический спектр непрерывен. Электроны, принадлежащие изолированным атомам, имеют определённые дискретные значения энергии. В твёрдом теле энергетический спектр электронов существенно иной, он состоит из отдельных разрешённых энергетических зон, разделённых зонами запрещённых энергий.

Согласно постулатам Бора, в изолированном атоме энергия электрона может принимать строго дискретные значения (также говорят, что электрон находится на одной из орбиталей).

В случае нескольких атомов, объединенных химической связью (например, в молекуле), электронные орбитали расщепляются в количестве, пропорциональном количеству атомов, образуя так называемые *молекулярные орбитали*. При дальнейшем увеличении системы до макроскопического кристалла (количество атомов более 10^{20}) количество орбиталей становится очень велико, а разница энергий электронов, находящихся на соседних орбиталях, соответственно очень маленькой, энергетические уровни расщепляются до двух практически непрерывных дискретных наборов — *энергетических зон*. Наивысшая из разрешённых энергетических зон в полупроводниках и диэлектриках, в которой при температуре 0 К все энергетические состояния заняты электронами, называется *валентной*, следующая за ней — *зоной проводимости*. В металлах зоной проводимости называется наивысшая разрешённая зона, в которой находятся электроны при температуре 0 К.

Уникальное состояние электрона в атоме (его волновая функция) определяется четырьмя квантовыми числами:

- 1) главным — n ;
- 2) азимутальным (орбитальным) — l ;
- 3) магнитным — m_l ;
- 4) магнитным спиновым — m_s .

1. Главное квантовое число n

Главное (радиальное) квантовое число – целое число, обозначающее номер энергетического уровня; оно также характеризует энергию электронов, занимающих данный энергетический уровень, является первым в ряду квантовых чисел. Этот ряд включает в себя главное, орбитальное и магнитное квантовые числа, а также спин.

Квантовое число n :

а) определяет энергию электрона в стационарном состоянии E_n (в квантовой физике стационарным состоянием атома называют состояние, при котором он имеет постоянную энергию):

$$E_n = - \frac{R}{n^2}, \quad (4.1)$$

где R – универсальная постоянная, $n=1, 2, 3, \dots, n$;

$$R = 8,3143 \cdot 10^3 \frac{\text{Дж}}{\text{кмоль} \cdot \text{град}} = 9,3143 \cdot 10^7 \frac{\text{эрг}}{\text{моль} \cdot \text{град}} = 1,9858 \frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{град}};$$

б) знак минус показывает, что энергия уменьшается с уменьшением радиуса орбиты;

в) радиусы устойчивых орбит возрастают пропорционально квадрату квантового числа (т.е. *числом n определяются большая ось эллиптической орбиты и основной энергетический уровень*).

2. Азимутальное квантовое число l

В физике орбитальное (азимутальное) квантовое число l определяет азимутальное распределение плотности амплитуды электрона в атоме, т.е. форму электронного облака, и подуровень энергетического уровня, задаваемого главным (радиальным) квантовым числом n :

а) состояния, для которых орбитальное квантовое число имеет значения $l = 0, 1, 2, 3$, называемые соответственно s -, p -, d -, f -состояниями. Электроны, находящиеся на этих уровнях, называются s -, p -, d -, f -электронами. Буквенные обозначения атомных орбиталей произошли от описания спектральных линий в атомных спектрах: s (*sharp*) – резкая серия в атомных спектрах, p (*principal*) – главная, d (*diffuse*) – диффузная, f (*fundamental*) – фундаментальная.

б) орбитальный момент количества движения (импульса) электрона:

$$P_l = \hbar * \sqrt{l * (l + 1)}, \quad (4.2)$$

где l может иметь при любом n значения $0, 1, 2, 3, \dots, n-1$;

в) малую ось эллиптической орбиты.

3. Магнитное квантовое число m_s

Магнитное квантовое число — параметр, который вводится при решении уравнения Шрёдингера для любого движения заряженной частицы, в том числе и электрона.

В 1896 г голландский физик Питер Зееман поместил в сильное магнитное поле устройство, аналогичное водородной лампе, но наполненное парами раскаленного натрия (Фарадей ставил аналогичный эксперимент в 1862 г. и потерпел неудачу). Обнаружилось, что в магнитном поле число линий в спектрах испускания возрастает. Спектры становятся сложными, но можно показать, что каждая p -линия распадается в магнитном поле на 3 новых линии, каждая d -линия — на 5, каждая f -линия — на 7 линий, а s -линии не изменяются. Поскольку орбитали атома становятся «видны» только в магнитном поле, очередное квантовое число, записывающее «адрес» орбитали в атоме, назвали магнитным квантовым числом m . Это квантовое число принимает целые значения от $-l$ до $+l$ (где l — орбитальное квантовое число), т.е. имеет ровно столько значений, сколько орбиталей существует на каждом подуровне.

Магнитное квантовое число m_l характеризует ориентацию в пространстве орбитального момента количества движения электрона или пространственное расположение атомной орбитали. Каждое из $2l+1$ возможных значений магнитного квантового числа определяет проекцию вектора орбитального момента на данное направление (обычно ось Z). Поскольку с орбитальным моментом связан магнитный момент, магнитное квантовое число, в частности, определяет проекцию орбитального магнитного момента водородоподобного атома на направление магнитного поля и служит причиной расщепления спектральных линий атома в магнитном поле (см. Эффект Зеемана).

Иногда магнитное квантовое число определяют для проекции любого момента частицы (орбитального L , спинного S , суммарного $J = L+S$). В этом случае оно принимает соответственно $2L+1$, $2S+1$, $2J+1$ значений. Для проекций спинного и суммарного моментов магнитное квантовое число может быть полуцелым.

Магнитное квантовое число в переходах между уровнями может изменяться лишь на определенное значение, устанавливаемое правилами отбора для данного типа перехода.

а) Магнитное квантовое число определяет ориентацию орбитального момента количества движения P_{ml} относительно избранного направления магнитного поля \vec{H} :

$$P_{ml} = m_l * \hbar, \quad (4.3)$$

P_{ml} может ориентироваться только так, чтобы проекция на \vec{H} была целым кратной (рис. 4.1).

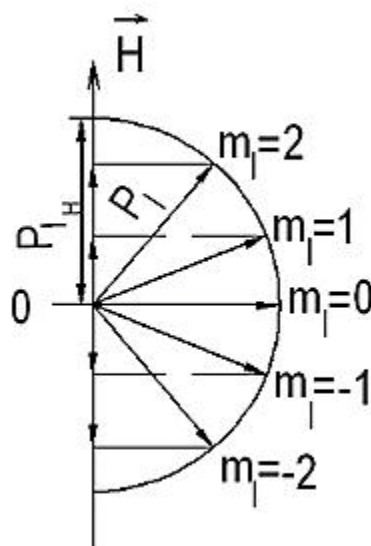


Рис. 4.1. Ориентация орбитального момента количества движения P_{ml} относительно выбранного направления \vec{H}

б) Определяет ориентацию эллиптической орбиты в пространстве.

4. Спиновое квантовое число S

Спин — собственный момент импульса элементарных частиц, имеющий квантовую природу и не связанный с перемещением частицы как целого. Спином называют также собственный момент импульса атомного ядра или атома; в этом случае спин определяется как векторная сумма (вычисленная по правилам сложения моментов в квантовой механике) спинов элементарных частиц, образующих систему, и орбитальных моментов этих частиц, обусловленных их движением внутри системы.

Спин измеряется в единицах (приведенных постоянных Планка или постоянных Дирака), характерных для каждого сорта частиц. Эти единицы являются целым (в том числе нулевым) или полуцелым положительным числом — так называемым спиновым квантовым числом, которое обычно называют просто спином (одно из квантовых чисел).

В связи с этим говорят о целом или полуцелом спине частицы.

Существование спина в системе тождественных взаимодействующих частиц является причиной новых квантово-механических явлений, не имеющих аналогии в классической механике, – *обменного взаимодействия и обменной энергии*.

а) Определяет проекцию собственного момента количества движения электрона (спина P_S) на направление \vec{H} (рис. 4.2).

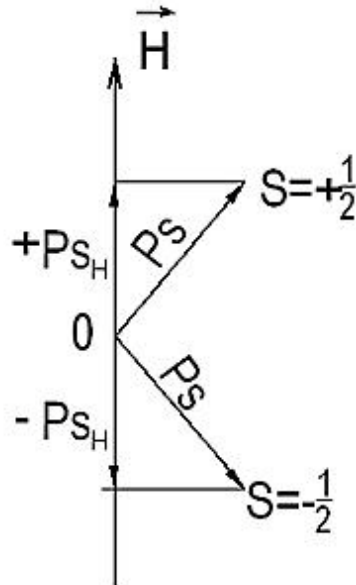
$$P_{SH} = S * \hbar. \quad (4.4)$$


Рис. 4.2. Ориентация вектора спина электрона

S может принимать лишь два значения: $S = +1/2$, $S = -1/2$.

Рассматривая атом водорода, мы отметили, что E_n (т.е. энергия электрона) зависит от главного квантового числа n . Но в отличие от атома водорода *энергия* электрона в любом другом *свободном атоме* зависит не только от главного, но и от *орбитального квантового числа* l , причем каждый энергетический уровень оказывается вырожденным.

Вырожденный уровень – уровень, которому соответствует не одно, а $2*(2l+1)$ различных состояний, отличающихся друг от друга квантовыми числами m_l , m_s .

Например, все s -уровни (при $l = 0$) имеют двукратное вырождение $2*(2*0+1)=2$; p -уровни (при $l = 1$) – шестикратное вырождение $2*(2*1+1)$ и т.д. На рис. 4.3 показано расположение энергетических уровней в свободном атоме и приведена кратность их вырождения.

Главное квантовое число n	Орбитальное квантовое число l	Энерг. уровни атома	Кратность вырождения	Расщепление уровней при снятии вырождения на $g=2l+1$ подуровней	Полное число e на подуровне $2(2l+1)$
3	2	3d	10		10
	1	3p	6		6
	0	3s	2	0	2
2	1	3p	6		6
	0	3s	2	0	2
1	0	3s	2	0	2

Рис. 4.3. Расположение энергетических уровней и кратность вырождения в свободном атоме

При помещении атома во внешнее поле энергия электронов изменяется, причем различным образом у электронов, находящихся в различных квантовых состояниях. Это приводит к снятию вырождения: каждый уровень расщепляется на подуровни в соответствии с кратностью его вырождения. Так как кратность вырождения $g = 2(2l + 1)$, то следовало бы ожидать возникновение из 1 уровня $2(2l + 1)$ подуровней.

Однако, вследствие того, что основное квантовое число оказывает слабое влияние на энергию электрона, состояния, различающиеся направлением спина электрона, обладают практически равными энергиями. Поэтому энергетические уровни расщепляются не на $2(2l+1)$, а лишь на $2l+1$ подуровней (см. 4 и 5 столбцы на рис. 4.3). На каждом таком подуровне может находиться два электрона с противоположно направленными спинами.

4.2. Коллективизация электронов в кристалле

В твердом теле расстояния между атомами так малы, что каждый из них оказывается в достаточно сильном поле своих соседей, с которыми он взаимодействует.

Выявим влияние этого взаимодействия на энергетические уровни.

1. Расположим N атомов Na на достаточно большом расстоянии, чтобы $r \gg a$ (параметр решетки Na), когда взаимодействием между ними можно пренебречь. Тогда каждый атом можно рассматривать как свободный и энергетические состояния электронов считать такими же, как и в отдельно взятом изолированном атоме (рис. 4.4).

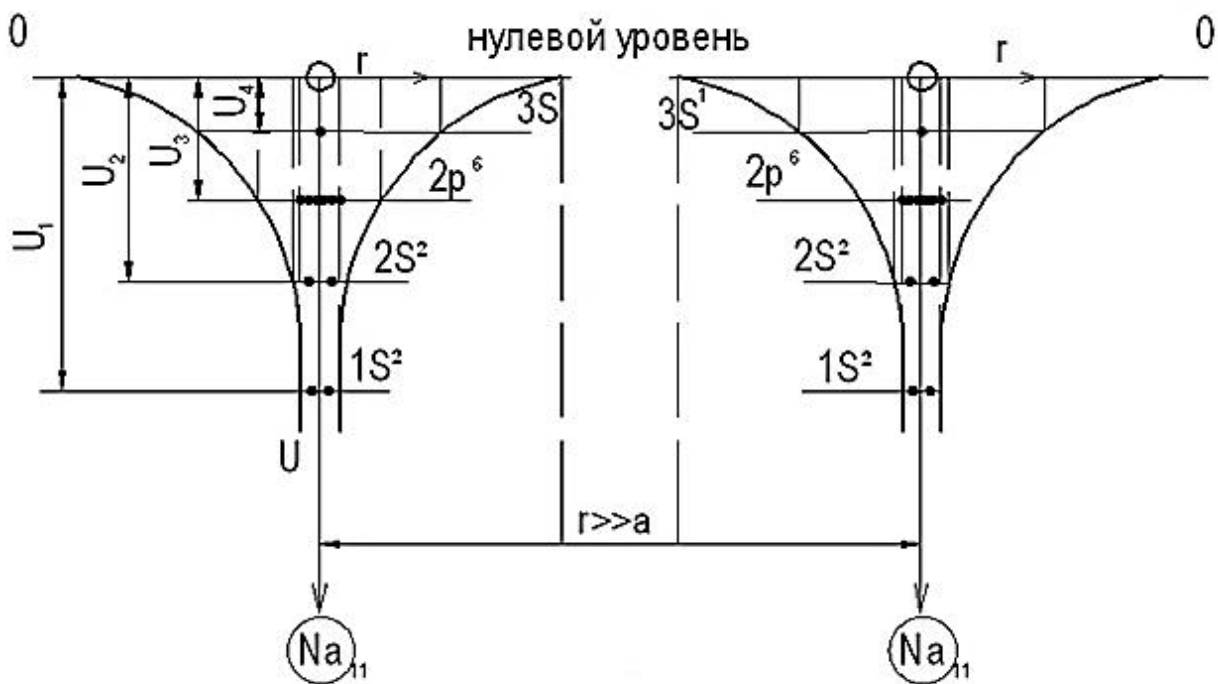


Рис. 4.4. Взаимодействие атомов в Na

Каждый атом *изображен* в виде веретенообразной потенциальной ямы, внутри которой проведены энергетические уровни 1s, 2s, 2p, 3s и т.д.:

- уровни 1s, 2s, 2p укомплектованы полностью,
- уровень 3s – наполовину,
- уровни выше 3s – свободны.

Высота барьера для электронов, находящихся на различных уровнях, различна: она равна расстоянию от этих уровней до нулевого уровня 00.

Потенциальный барьер препятствует свободному переходу электронов от одного атома к другому.

2. При сближении атомов взаимодействие между ними растет и на расстоянии a достигает своей нормальной величины.

3. На рис. 4.5 показана картина, отвечающая такому сближению.

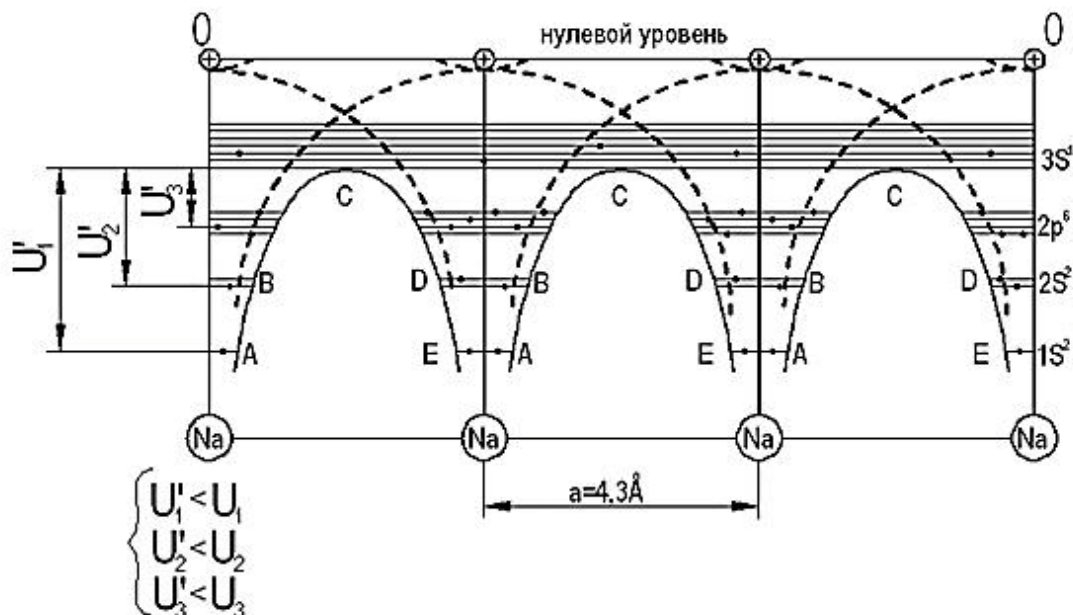


Рис. 4.5. Взаимодействие атомов в Na после сближения

Из рис. 4.5 видно, что потенциальные кривые, отделяющие соседние атомы (пунктир), частично *налагаются* друг на друга и дают результирующую кривую $ABCDE$, проходящую ниже нулевого уровня 00 . Это означает, что *сближение* атомов вызывает *уменьшение не только толщины потенциального барьера, но и его высоты*.

Для электронов уровня $1s$ высота барьера становится равной U_1' , для $2s$ $U_{2s} = U_2'$, для $2p$ $U_{2p} = U_3'$. Замечательно, что высота барьера оказывается даже несколько ниже первоначального уровня валентных электронов $3s$.

Волновые функции этих электронов у соседних атомов перекрываются настолько сильно, что *образуют электронное облако практически равномерной плотности* (на рис. 4.6 плотность результирующего электронного облака показана пунктиром), вследствие чего вероятность оказывается одной и той же.

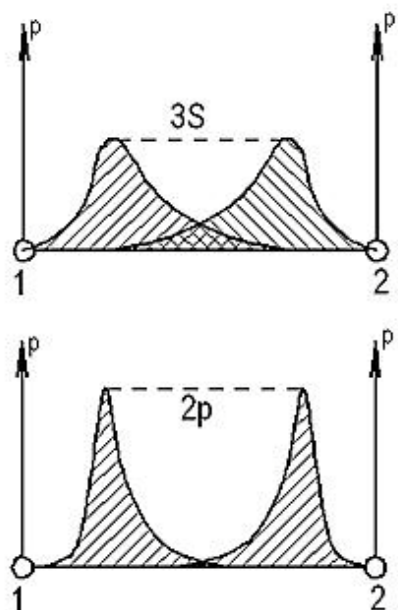


Рис. 4.6. Плотность результирующего электронного облака после взаимодействия двух электронов для 3s- и 2p-уровней

Перекрытие волновых функций электронов соседних атомов означает появление возможности перемещения электронов по кристаллу. Действительно, волновые функции перекрываются, если волновые функции данного атома, например у атома 1 (рис. 4.6), простираются дальше середины расстояния до соседнего атома 2, электрон же, проникающий за эту границу, притягивается уже сильнее, чем «собственным» атомом. Таким образом, происходит переход электрона от атома к атому, т.е. их поступательное движение в кристалле.

Следует отметить, что свободу перемещения по кристаллу получают не только электроны 3s, но и электроны более глубоких уровней – 2s, 2p и даже 1s. Это перемещение происходит путем *туннельного просачивания* их *сквозь потенциальные барьеры*, отделяющие соседние атомы, и происходит с тем большей вероятностью, чем сильнее перекрываются волновые функции электронов соседних атомов (рис. 4.6).

Например, подсчет показывает, что волновые функции электронов 1s в кристалле Na перекрываются настолько слабо, что переход этих электронов от атома к атому совершается в среднем лишь один раз за 3 часа, у электронов 2p – чаще и у 3s настолько сильно перекрываются волновые функции, что частота их перехода от атома к атому достигает 10^{15} с^{-1} .

Такие электроны называют свободными, а совокупность свободных *e* носит название электронного газа.

Появление свободы перемещения электронов по кристаллу, независимо от степени этой свободы, делает невозможным определение принадлежности электрона какому-либо одному атому кристалла. Каждый электрон с равным правом принадлежит теперь всему кристаллу в целом, иными словами, в кристалле происходит коллективизация электронов.

4.3. Превращение энергетических уровней свободных электронов в энергетические зоны в кристалле

Перекрытие волновых функций электронов соседних атомов, делающее возможным поступательное перемещение электронов в кристалле путем туннельного просачивания их сквозь потенциальные барьеры, разделяющие соседние атомы, приводит еще к одному важному следствию – к расщеплению уровней на большое число подуровней и образованию из них энергетических зон (рис. 4.7).

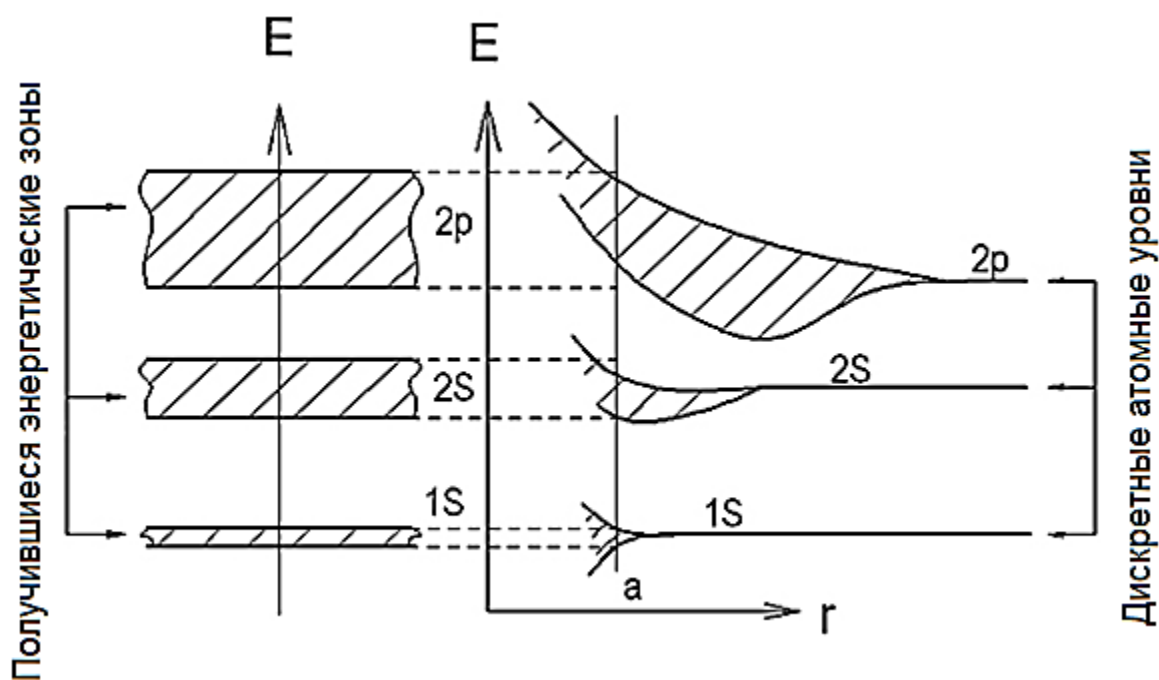


Рис. 4.7. Расщепленные энергетические зоны для 3s- и 2p-уровней

Ширину этих зон можно приблизительно оценить, пользуясь соотношением неопределенностей:

$$\Delta E * \tau = h, \quad (4.5)$$

где ΔE – неопределенность энергий электрона в состоянии, в котором он находится в течение времени τ ; h – постоянная Планка, численно равная $h = 6,6261 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с} = 6,6261 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с}$.

Теперь рассмотрим на примере атома Na образование энергетических зон и определение их ширины.

1. Для электрона 1s время нахождения у данного атома составляет, как уже упоминалось, $\tau \sim 3 \text{ ч}$. Подставляем в выражение 4.5, получаем:

$$\Delta E_{1s} \approx \frac{h}{\tau} \approx \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{10^4 \text{ с}} \approx 6,62 \cdot 10^{-38} \text{ Дж} = 4 \cdot 10^{-19} \text{ эВ}.$$

1эВ соответствует энергии $1,601864 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} = 1,601864 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}$. Это постоянная величина, поэтому зону 1s можно считать столь же узкой, как и сам атомный уровень 1s.

2. Для электрона 3s частота перехода от атома к атому составляет $\nu \approx 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\tau = \frac{1}{\nu} \approx 10^{-15} \text{ с}$, тогда

$$\Delta E_{3s} \approx h\nu \approx \frac{6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}}{10^{-15} \text{ с}} \approx 6,62 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 4 \text{ эВ}$$

Таким образом, энергетические зоны, которые образуются из *внешних атомных уровней*, имеют ширину порядка 1 эВ, и эти зоны разделены между собой зонами запрещенных энергий.

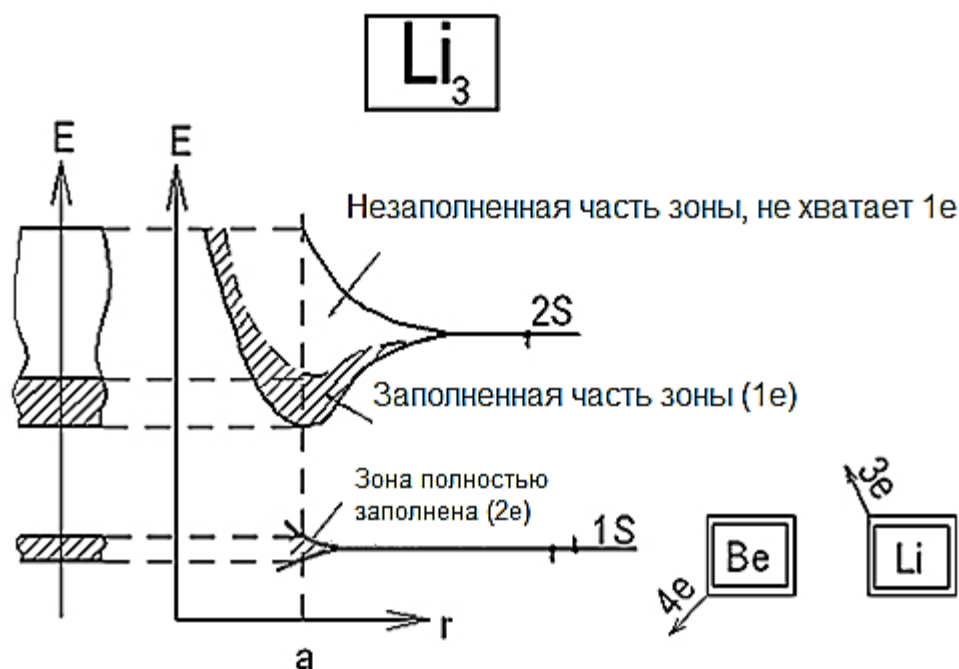


Рис. 4.8. Расщепленные энергетические зоны для атома Li

Рассмотрим атом лития, самого легкого металла (рис. 4.8).

- Каждый атом Li имеет полностью заполненный уровень $1s$ ($2e$) и частично заполненный уровень $2s$ ($1e$).
- При расщеплении этих уровней в зоны образовалась нижняя заполненная и верхняя частично заполненная зона
- Переход из нижней зоны в верхнюю возможен при получении электроном дополнительной энергии больше ширины запрещенной зоны. Внутри зоны этот переход возможен при меньших энергиях.

В атоме же Be, переходного по свойствам металла, зоны $1s$ и $2s$ заняты полностью, но так как верхняя зона образовалась за счет перекрытия зон $2s$ и $2p$, то зона имеет по 6 свободных уровней на каждый атом, т.е. электроны уровня $2s$ легко могут переходить на уровни $2p$ внутри верхней зоны и менять энергию (рис. 4.9).

В кристалле Be зоны $2s$ и $2p$ перекрываются друг другом, образуя смешанную (гибридную) зону. Аналогичная картина наблюдается и у других элементов этой группы таблицы Менделеева.

Именно поэтому металлический бериллий относительно мало реакционноспособен при комнатной температуре, зато при высоком нагреве реагирует и с аммиаком, и с водяными парами.

Таким образом, электроны верхних уровней (зон) участвуют в проводимости без значительных затрат энергии, обуславливая высокую электропроводность металлов.

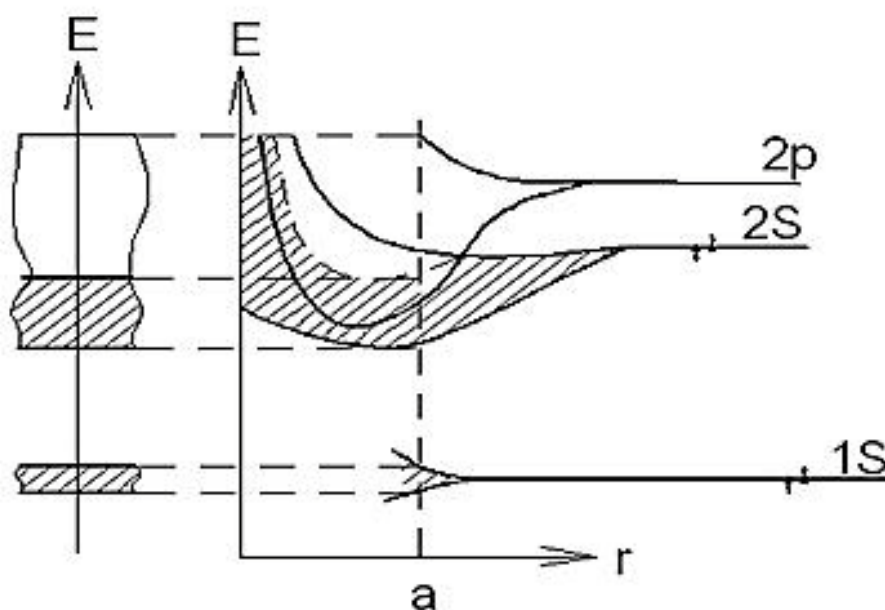


Рис. 4.9. Расщепленные энергетические зоны для атома Be

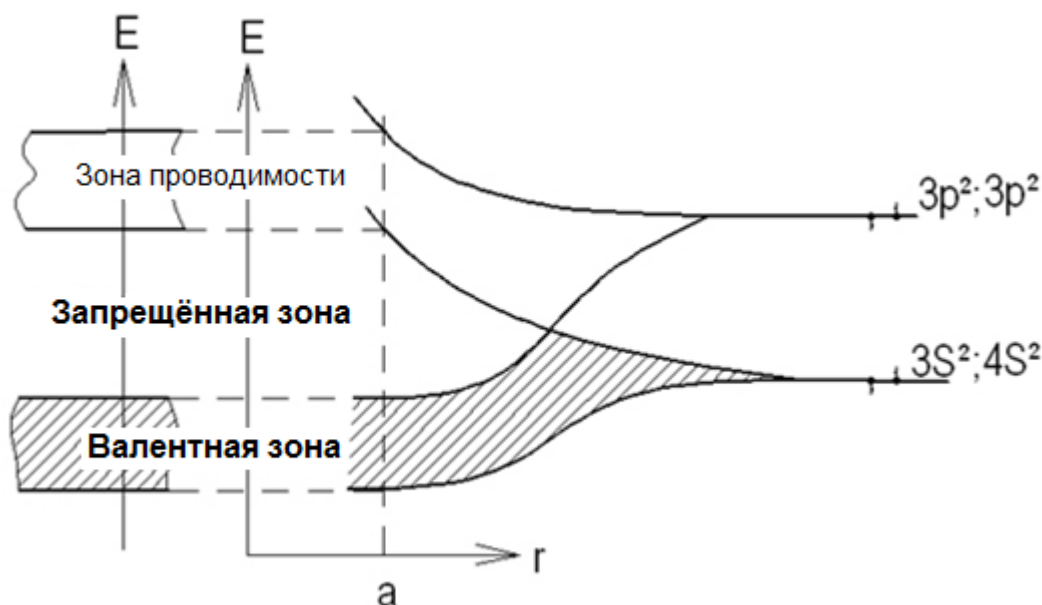


Рис. 4.10. Расщепленные энергетические зоны для атома алмаза (углерод)

На рисунке 4.10 приведены зоны элементов, имеющих структуру алмаза (алмаз, Si, Ge). У них несколько иначе, в отличие от бериллия, происходит расщепление. Образованные из уровней S и P, перекрываясь, зоны разделяются на 2 участка, так что в каждом из таких участков содержится по 4 состояния на атом: одно S-состояние и три P-состояния. Эти зоны разделены запрещенной зоной. Нижнюю разрешенную зону называют валентной, а верхнюю – зоной проводимости.

4.4. Движение электрона в периодическом поле кристалла

Рассмотрим движение совершенно свободного электрона вдоль оси X в кристалле. Такое движение описывается волновой функцией $\Delta\Psi_{(x)}$, удовлетворяющей уравнению Шредингера:

$$\Delta\Psi + \frac{2\pi^2 m}{h^2} * E * \Psi = 0, \quad (4.6)$$

где E – энергия электрона; m – его масса; $\Delta\Psi$ – волновая функция.

Решением уравнения Шредингера является уравнение плоской бегущей волны (рис. 4.11):

$$\Psi_{(x)} = A * e^{i\vec{k}\vec{x}}, \quad (4.7)$$

где \vec{k} – это волновой вектор, по направлению совпадающий с направлением движения электрона; A – амплитуда волны.

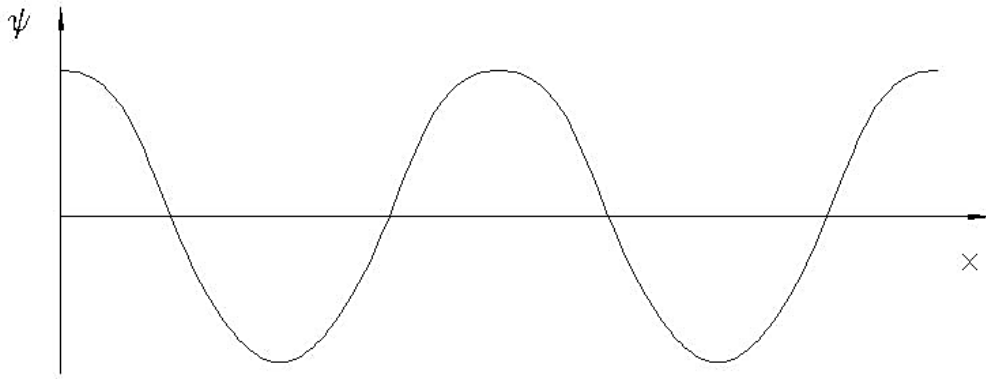


Рис. 4.10. Уравнение плоской бегущей волны, описывающее движение свободного электрона вдоль оси X в кристалле

Волновой вектор можно найти из выражения

$$\vec{k} = \sqrt{\frac{2*m}{\hbar^2} * E}. \quad (4.8)$$

Вероятность обнаружения электрона в различных точках пространства равна квадрату модуля волновой функции:

$$|\Psi|^2 = A * e^{i\vec{k}\vec{x}} * A * e^{-i\vec{k}\vec{x}} = A^2. \quad (4.9)$$

Заметим, что вероятности нахождения свободного электрона в любой точке пространства равновелики (рис. 4.11).

Из уравнения (4.8) следует, что энергия свободного электрона однозначно связана с его волновым вектором \vec{k} :

$$E = \frac{\hbar^2 * \vec{k}^2}{2*m}. \quad (4.10)$$

Кривая этой зависимости $E(\vec{k})$ называется *дисперсионной кривой*. Энергия свободного электрона связана с волновым вектором \vec{k} квадратичной зависимостью (рис. 4.12).

Иначе обстоит дело в случае решетки, т.е. для электрона, движущегося в периодическом поле кристалла, образованного правильно расположенными ионами решетки (рис. 4.13).

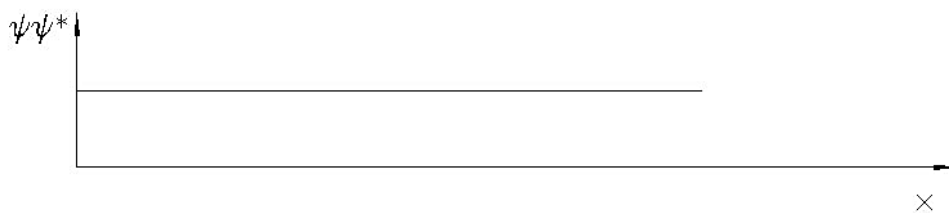


Рис. 4.11. Квадрат модуля волновой функции

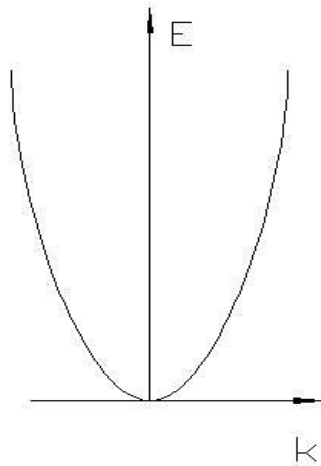


Рис. 4.12. Зависимость энергии электрона от волнового вектора \vec{k}

Вследствие взаимодействия электрона с этими ионами вероятность обнаружения его в данном месте кристалла должна быть *периодической* функцией координаты X , так как положения, отличающиеся друг от друга на величину, кратную параметру решетки a (например, положения А и В, рис. 4.13), для электрона являются одинаково вероятными. Различными будут только положения в пределах одного периода a . Это означает, что *амплитуда волновой функции $\Psi(x)$ электрона, движущегося в периодическом поле кристалла, не является постоянной величиной, как для свободного электрона, а периодически меняется или модулирована с периодом, равным периоду решетки a .*

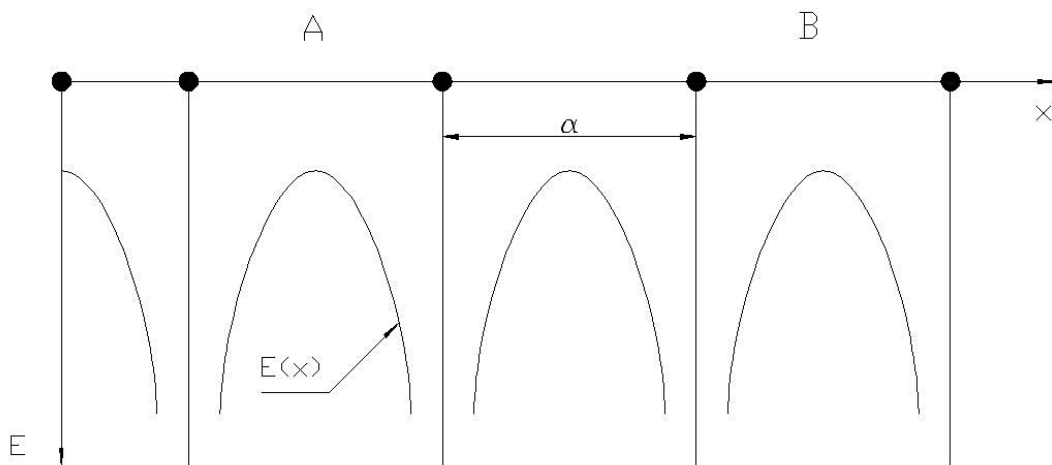


Рис. 4.13. Периодическое поле кристалла

Обозначим эту амплитуду через $U(x)$, тогда волновую функцию для электрона, движущегося в периодическом поле кристалла в направлении X , можно представить в виде

$$\Psi_{(x)} = U_{(x)} * e^{i\vec{k}x}. \quad (4.11)$$

Причем $U_{(x+n*a)} = U_{(x)}$, где n – целое число.

Функцию (4.11) называют *функцией Блоха*. Соответственно изменяется и *дисперсионная кривая для электронов*, движущихся в кристалле.

Во-первых, как было показано ранее, энергетический спектр таких электронов имеет зонный характер: *полосы разрешенных энергий*, образовавшиеся из соответствующих атомных уровней, *отделены друг от друга зонами запрещенных энергий*.

Во-вторых, как показывает расчет, *внутри каждой зоны энергия электрона является периодической функцией от волнового вектора \vec{k}* и для одномерного кристалла (одномерной цепочки атомов) с параметром a может быть выражена следующим соотношением:

$$E_{(K)} = E_a + 2 * A * \cos \vec{k}a + c, \quad (4.12)$$

где $E' = E_a + c$; E_a – энергия атомного уровня, из которого образовалась зона; c – сдвиг этого уровня под действием соседних атомов; A – так называемый обменный интеграл, учитывающий появившуюся в кристалле возможность перехода электронов от одного атома к другому вследствие перекрытия их волновых функций. Чем сильнее перекрываются волновые функции, тем больше A . Для S-состояний A_s меньше 0, для P-состояний A_p больше 0.

Для S- и P-состояний можно записать:

$$\begin{aligned} E_{S(K)} &= E'_S - 2 * A_s * \cos \vec{k}a, \\ E_{P(K)} &= E'_P + 2 * A_p * \cos \vec{k}a. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Это уравнения зависимости E от волнового вектора для S- и P-состояний, где A_s и A_p – абсолютные величины обменного интеграла; $E' = E_a + c$ для S- и P-зон соответственно.

Рассмотрим теперь такое понятие, как *зона Бриллюэна*.

Зависимость энергии электрона от волнового вектора имеет разрывы при $\vec{k} = \pm n \frac{\pi}{a}$, где n – целое число.

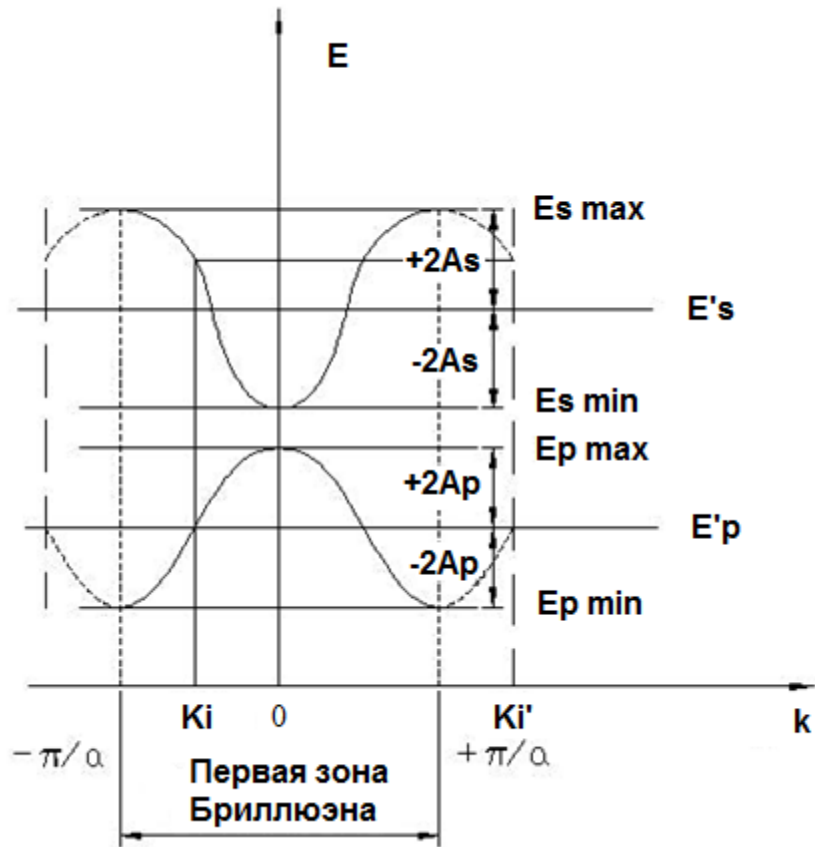


Рис. 4.14. Зависимость энергии электрона на S- и P-уровнях от волнового вектора для случая одномерной цепочки атомов

Рис. 4.14 демонстрирует дисперсионные кривые $E(\vec{k})$ для S- и P-зон, построенные по уравнениям (4.13). Для P-зоны при $\vec{k} = 0$ значение $E_p(\vec{k})$ становится максимальным и равняется

$$E_{p \max} = E'_p + 2 * A_p. \quad (4.14)$$

При $\vec{k} = \pm n * \frac{\pi}{a}$ значение $E_p(\vec{k})$ становится минимальным и равным

$$E_{p \min} = E'_p - 2 * A_p. \quad (4.15)$$

Ширина P-зоны равна

$$\Delta E_p = E_{p \max} - E_{p \min} = 4 * A_p. \quad (4.16)$$

Сама кривая $E_p(\vec{k})$ имеет вид колокола, обращенного выпуклостью вверх (рис. 4.14).

Для S-состояний

$$\begin{aligned} E_{s \max} &= E'_s + 2 * A_s, \text{ при } \vec{k} = \pm n * \frac{\pi}{a}, \\ E_{s \min} &= E'_s - 2 * A_s, \text{ при } \vec{k} = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Ширина S-зоны равна

$$\Delta E_s = E_{s \max} - E_{s \min} = 4 * A_s. \quad (4.18)$$

Кривая $E_s(\vec{k})$ имеет вид колокола, обращенного выпуклостью вниз.

Таким образом, ширина разрешенных зон энергий определяется величиной обменного интеграла A , зависящего от степени перекрытия волновых функций соседних атомов.

Чем выше атомный уровень, тем сильнее перекрываются волновые функции электронов этого уровня в кристалле, тем больше абсолютная величина обменного интеграла A , тем шире энергетическая зона, образованная из данного уровня.

Область значений \vec{k} , простирающаяся от $k = -\frac{\pi}{a}$ до $k = +\frac{\pi}{a}$, в пределах которой энергия электрона претерпевает полный цикл своего изменения, называется *первой зоной Бриллюэна*, она имеет протяженность $\frac{2\pi}{a}$.

Несмотря на кажущуюся «математичность» и оторванность от реальной жизни данного понятия, зона Бриллюэна играет важнейшую роль в физике твёрдого тела, например, в дифракции излучения: на кристаллической решётке дифрагируют только те лучи, волновой вектор которых оканчивается на границе зоны Бриллюэна.

Вследствие существования периодичности кристаллической решётки и конкретно зоны Бриллюэна в кристалле возникают запрещённые и разрешённые энергетические состояния.

Возникновение запрещённых зон связано с тем, что для электронных волн определённых длин на границе зоны Бриллюэна создаётся условие брэгговского отражения, и электронная волна отражается от границы зоны. Физически это равносильно тому, что возникает стоячая волна, и, следовательно, групповая скорость данной электронной волны равна нулю. Таким образом, возникает интервал запрещённых частот (энергий).

4.5. Понятие об эффективной массе электрона

Для свободного электрона импульс связан с длиной электронной волны соотношением Де-Бройля:

$$\lambda = \frac{h}{m^*V}. \quad (4.19)$$

Откуда,

$$V = \frac{\hbar}{m} * \frac{2*\pi}{\lambda} = \frac{\hbar}{m} * k, \quad (4.20)$$

т.е.

$$V = \frac{\hbar}{m} * k. \quad (4.21)$$

Вспомним выражение (4.10) для энергии свободного электрона через волновой вектор:

$$E = \frac{\hbar^2 * k^2}{2 * m}. \quad (4.22)$$

Продифференцируем выражение энергии по k :

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} * k. \quad (4.23)$$

Сравним выражения (4.22) и (4.23) и подставим в выражение (4.21) вместо m её значение через энергию:

$$m = \frac{\hbar^2 * k}{\frac{dE}{dk}}. \quad (4.24)$$

Получим теоретическую мгновенную скорость движения электрона

$$V = \frac{\hbar}{m} * k = \frac{1}{\hbar} * \frac{dE}{dk}. \quad (4.25)$$

Однако движение электрона в кристалле более сложно из-за наличия в нем периодического поля. Поэтому соотношение (4.25), связывающее мгновенные значения энергии, волнового вектора и скорости движения, не выполняются для кристалла. Если же под V понимать *не мгновенную, а среднюю скорость электрона в кристалле*, то выражение справедливо:

$$V_{\text{cp}} = \frac{1}{\hbar} * \frac{dE}{dk}. \quad (4.26)$$

Если в кристалле имеется внешнее электрическое поле $\vec{\varepsilon}$, то оно будет действовать на электрон с силой $\vec{F} = -e * \vec{\varepsilon}$. На пути $dx = V_{\text{cp}} * dt$ сила \vec{F} производит работу $\vec{F}dx = F * V_{\text{cp}} * dt$, идущую на изменение энергии электрона dE :

$$dE = \vec{F}dx = F * V_{\text{cp}} * dt, \text{ откуда} \\ \frac{dE}{dt} = F * V_{\text{cp}}. \quad (4.27)$$

Среднее ускорение, с которым движется электрон в кристалле под действием внешнего поля равно

$$\omega_{\text{cp}} = \frac{dV_{\text{cp}}}{dt} = \frac{1}{\hbar} * \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right). \quad (4.28)$$

Подставим сюда dE/dt из выражения (4.27) и среднюю скорость из (4.26):

$$\omega_{\text{ср}} = \frac{1}{\hbar} * \frac{d}{dk} \left(\frac{dE}{dt} \right) = \frac{1}{\hbar} * \frac{d}{dk} (F * V_{\text{ср}}) = \frac{1}{\hbar^2} * \frac{d^2 E}{dk^2} * F. \quad (4.29)$$

Формула (4.29) связывает ускорение, с которым движется электрон в периодическом поле кристалла, с внешней силой \vec{F} , действующей на электрон со стороны внешнего поля, т.е. выражает второй закон Ньютона.

Под действием внешней силы \vec{F} электрон в периодическом поле кристалла движется в среднем так, как двигался бы под действием этой силы *свободный электрон*, обладающий *массой m^** . Тогда

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}. \quad (4.30)$$

Масса m^* называется *эффективной массой электрона*.

Приписывая электрону, находящемуся в периодическом поле кристалла, массу m^* , можно считать этот электрон свободным и описывать его движение во внешнем поле так, как мы описываем движение обычного электрона.

Каков физический смысл эффективной массы?

1. Это коэффициент пропорциональности, связывающий между собой внешнюю силу, действующую на частицу, и ее *среднее ускорение*.

2. Следовательно, величина m^* , в отличие от массы, *не определяет ни запаса энергии, ни тяготения, ни инерционных свойств*.

3. В анизотропных трехмерных кристаллических решетках $\frac{1}{m^*}$ *зависит от направления и выражается тензором*, тогда как обычная масса скалярная.

4. Также *направление силы \vec{F} и ускорения* могут в этом случае *не совпадать*.

5. Эффективная масса может иметь *отрицательное значение*.

ТЕМА 5. Полупроводники с точки зрения зонной теории

5.1. Заполнение зон электронами

Определим количество состояний в энергетической зоне ΔE . Обратимся к картине, возникающей при сближении атомов Na в идеализированной модели, рассмотренной ранее.

Когда N атомов находятся далеко друг от друга, наличие других атомов системы не должно влиять на состояние электронов. Однако оказывается, что любой невырожденный атомный уровень E_a повторяется в системе N раз. Иначе говоря, *уровень, невырожденный в атоме, оказывается N -кратно вырожденным в системе, состоящей из N взаимодействующих атомов.* Такое вырождение называется *перестановочным*.

При сближении атомов и образовании кристалла между ними возникает взаимодействие, которое приводит к снятию вырождения вообще и перестановочного в частности. В результате этого каждый энергетический уровень, невырожденный в системе из N атомов, N -кратно вырожденный, расщепляется на N близко расположенных друг от друга подуровней, образующих *энергетическую зону кристалла*. Если энергетические уровни в атоме имели $(2l+1)$ -кратные вырождения (без учета спина), то соответствующие им энергетические зоны будут состоять из $(2l+1)*N$ различных состояний. Обычно ширина ΔE приблизительно составляет доли электрон-вольта, а состояние между уровнями в разрешенной зоне для кусочка объемом один кубический сантиметр составляет около 10^{-22} эВ.

В соответствии с *принципом Паули* в каждом таком состоянии может находиться не более двух электронов с противоположными спинами. При ограничении числа электронов, содержащихся в твердом теле, заполненными окажутся лишь несколько наиболее низких энергетических зон.

По характеру заполнения зон электронами все тела можно разделить на две большие группы.

К *1-й группе* относятся тела, у которых над целиком заполненными зонами располагается зона, *заполненная лишь частично* (см. далее по

тексту рис. 5.1, а, б). Такая зона возникает в том случае, когда атомный уровень, из которого она образуется, заполнен в атоме не полностью. Типичным примером могут служить щелочные металлы. Например, у Na на уровне 3s находится 1 электрон, а для заполнения этого уровня необходимо 2 электрона.

Частично заполненная зона может возникать и вследствие наложения заполненных зон на пустые или частично заполненные зоны, как это имеет место у Be и щелочно-земельных металлов (рис.4.9). Наличие частично заполненной зоны характерно для металлов.

Ко 2-й группе относятся тела, у которых *над целиком заполненными зонами находятся пустые зоны* (рис. 5.1, в). Типичным примером тел с таким энергетическим спектром являются элементы 4-й группы таблицы Менделеева: углерод в модификации алмаза, Si, Ge, серое олово. К этой же группе относятся многие химические соединения: оксиды, нитриды, карбиды и т.д.

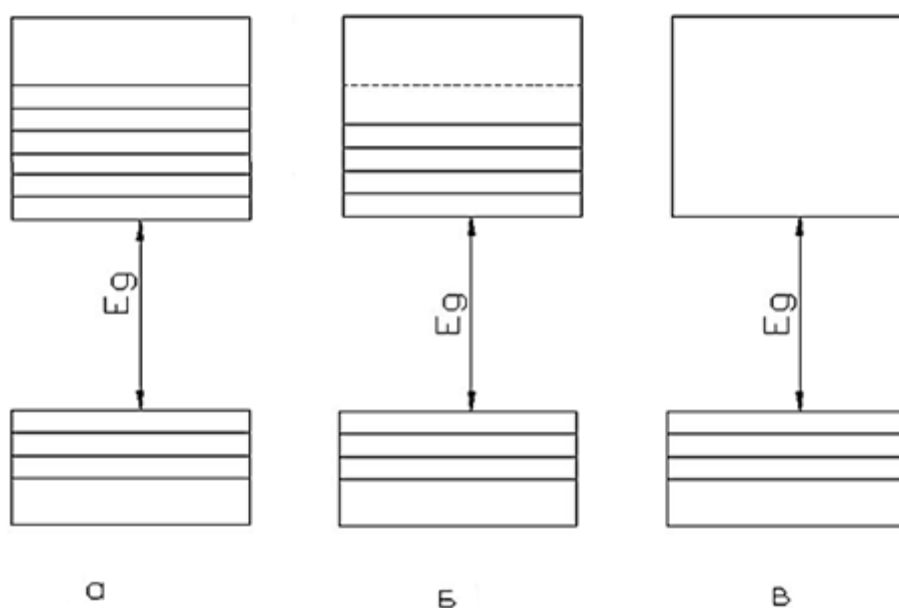


Рис. 5.1. Проводник с полностью заполненной зоной проводимости (а), проводник с не полностью заполненной зоной проводимости (б), диэлектрик (в)

Согласно зонной теории твердых тел электроны внешних энергетических зон имеют практически одинаковую свободу движения во всех телах, независимо от того, являются ли эти тела металлами или диэлектриками. Переход осуществляется путем туннельного просачивания электронов сквозь потенциальные барьеры, разделяющие соседние атомы

кристаллической решетки. Несмотря на это, электрические свойства этих тел могут различаться очень сильно (*например, электропроводностью*).

У металлов удельная электропроводность $\sigma \approx 10^3..10^4 \text{ Ом}^{-1} * \text{м}^{-1}$, у диэлектриков $\sigma < 10^{-14} \text{ Ом}^{-1} * \text{м}^{-1}$.

Таким образом, наличие «свободных электронов», способных перемещаться по объему всего кристалла, является лишь необходимым условием для появления у тел проводящих свойств, но не достаточным.

Для того чтобы сформировать и достаточные условия, рассмотрим с точки зрения зонной теории поведение во внешнем поле электронов, находящихся в частично заполненных зонах кристалла.

Создадим в кристалле внешнее поле $\vec{\mathcal{E}}$. На каждый электрон это поле действует с силой $\vec{F} = -e * \vec{\mathcal{E}}$, которая стремится уменьшить скорость электронов, движущихся против силы, и увеличить ее у электронов, движущихся в направлении силы. *Изменение скорости должно неизбежно приводить к изменению энергии электрона, т.е. к переходу его в новые квантовые состояния.* Такие переходы могут осуществляться, очевидно, лишь в том случае, если в энергетической зоне, к которой принадлежат данные электроны, имеются незанятые состояния, т.е. зона укомплектована не полностью. В этом случае даже слабое электрическое поле способно сообщить электронам достаточный добавочный импульс, чтобы перевести их на близлежащие свободные уровни. В теле появится преимущественное движение электронов против поля, обуславливающее возникновение электрического тока. Такие тела являются хорошими проводниками.

Теперь представим себе, что валентная зона кристалла заполнена целиком и отделена от близлежащей свободной зоны широкой энергетической щелью E_g (рис. 5.1, в). Внешнее поле, приложенное к такому кристаллу, не в состоянии изменить характер движения электронов в валентной зоне, так как оно не способно поднять электроны в вышележащую свободную зону.

Внутри же самой валентной зоны, не содержащей ни одного свободного уровня, оно не может вызвать изменение состояния электронов и привести к появлению направленного движения, т.е. к появлению тока. Вследствие чего такие тела должны обладать практически нулевой проводимостью.

Таким образом, *достаточным условием* появления у тел высокой *проводимости* является наличие в их энергетическом спектре зон, *укомплектованных лишь частично*, как это имеет место у *типичных металлов*.

Отсутствие же таких зон в энергетическом спектре твердых тел второй группы делает их непроводниками, несмотря на наличие в них «свободных электронов», способных двигаться по кристаллу.

По ширине запрещенной зоны тела второй группы делят на *диэлектрики* и *полупроводники*.

К *диэлектрикам* относят тела, имеющие относительно широкую запрещенную зону $E_g > 3$ эВ; так, у алмаза она равна 5,2 эВ, у оксида алюминия примерно 7эВ.

К *полупроводникам* относятся тела, имеющие относительно узкую запрещенную зону.

Рассмотрим более подробно эту группу тел. У типичного полупроводника $E_g = 1,5$ эВ. У Ge оно равно 0,65 эВ, у Si 1,8 эВ, у антимонида индия 0,17 эВ, у арсенида галлия 1,43 эВ.

5.2. Собственные полупроводники

Химически чистые полупроводники называются собственными. К ним относятся Ge, Si, Se, Te и другие химически чистые элементы 3-й или 5-й групп таблицы Менделеева.

На рис. 5.2. показана упрощенная схема зонной структуры собственных полупроводников:

а) при абсолютном нуле (рис. 5.2, а) валентная зона укомплектована полностью, а зона проводимости пуста. Проводимость отсутствует;

б) с повышением t термически возбуждаются e в валентной зоне и приобретают энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны и перехода в зону проводимости (рис. 5.2, б).

Это приводит к появлению в зоне проводимости свободных e , а в валентной зоне – свободных уровней, на которые могут переходить e . При приложении внешнего электрического поля в полупроводниках возникает электрический ток (направленное движение электронов). Кристалл становится проводящим. Чем меньше ширина запрещенной зоны и выше

температура кристалла, тем больше электронов переходит в зону проводимости и тем выше должна быть электропроводность кристалла.

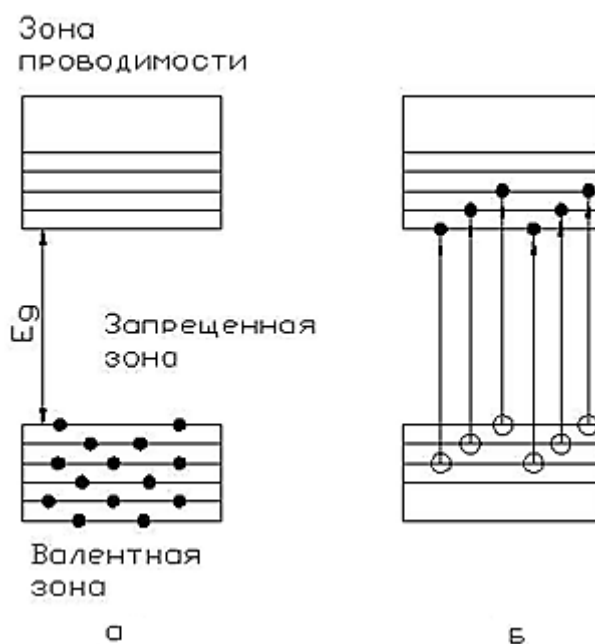


Рис. 5.2. Упрощённая схема зонной структуры собственного полупроводника при абсолютном нуле (а) и повышенной температуре (б)

К примеру, у Ge ($E_g = 0,65$ эВ) уже при комнатной температуре концентрация электронного газа в зоне проводимости достигает величины примерно $2,5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ и удельное сопротивление около $0,48 \text{ Ом} \cdot \text{м}$.

В то же время у GaAs ($E_g = 1,43$ эВ) при комнатной температуре концентрация газа $5 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$ и $\rho \approx 1,5 \cdot 10^3 \text{ Ом} \cdot \text{м}$, а при температуре, равной 600 К, эти показатели приближаются к показателям Ge при комнатной температуре.

Проводимость полупроводника является проводимостью возбужденной: она появляется под воздействием внешнего фактора, способного сообщить электронам валентной зоны энергию, достаточную для переброса их в зону проводимости. Такими факторами могут быть:

- а) нагревание полупроводника;
- б) облучение светом;
- в) облучение другими ионизирующими излучениями.

Разделение тел на полупроводники и диэлектрики носит в значительной мере условный характер. Большую роль играет температура, например, алмаз имеет такую же электропроводность, как у Ge при

комнатной температуре, если его разогреть до температуры, равной 2300 К.

По мере того как начинают использоваться материалы со все большей шириной запрещенной зоны, деление тел на полупроводники и диэлектрики утрачивает смысл.

5.3. Понятие о «дырках»

Под воздействием внешнего электрического поля электроны валентной зоны после ухода части из них в зону проводимости имеют возможность переходить на свободные уровни и создавать в кристалле электрический ток. Следует отметить, что для зоны, укомплектованной электронами полностью, $i = 0$, и такой случай мы рассматривать не будем.

Мгновенный ток, создаваемый одним электроном, движущимся со скоростью V , равен

$$\vec{i} = -e^* \vec{v}. \quad (5.1)$$

Допустим, что таким электроном является электрон, состояние которого характеризуется волновым вектором k_s (рис. 5.3).

В отсутствие внешнего электрического поля электроны занимают низшие энергетические состояния, а их распределение по k является симметричным (рис. 5.3, а).

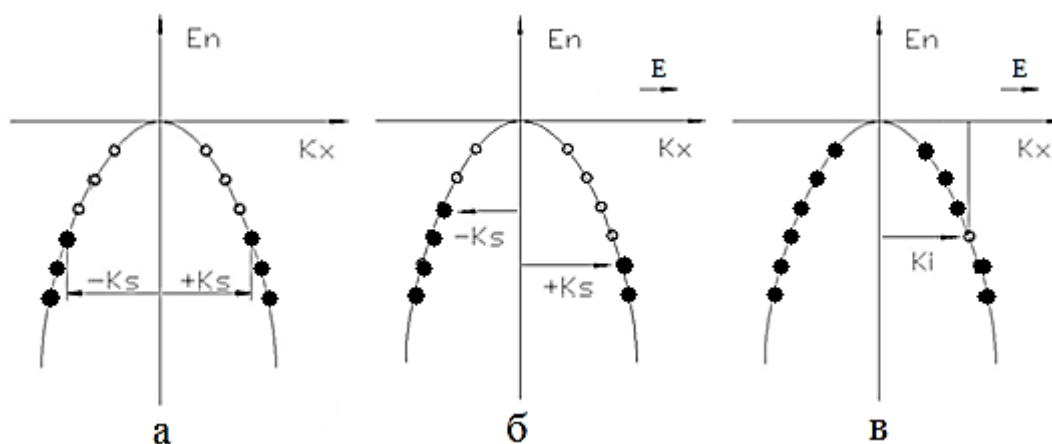


Рис. 5.3. Дисперсионные кривые для не полностью укомплектованной валентной зоны при отсутствии внешнего поля (а), при воздействии поля против оси X (б) и для полностью укомплектованного уровня с отсутствующим одним e (в)

Под действием внешнего поля \vec{E} , приложенного в направлении оси X , все электроны стремятся увеличить свой волновой вектор в противоположном направлении, вследствие чего их симметрия

распределения по k нарушается и это создает некомпенсированный поток электронов, который, в свою очередь, приводит к возникновению тока (рис. 5.3, б).

Результирующий мгновенный ток, создаваемый всеми электронами валентной зоны, равен

$$i_{\text{рез}} = -e * \sum_S V_S = 0. \quad (5.2)$$

Суммирование проводится по всем состояниям, занятым электронами. Вообще, если не вдаваться в подробности, внешнее электрическое поле стремится нарушить симметрию в распределении электронов по скоростям, ускоряя электроны, движущиеся в направлении действующих электрических сил, и замедляя частицы с противоположно направленным импульсом (он же волновой вектор k для e). Однако подобное ускорение и замедление связано с изменением энергии электронов, что должно сопровождаться переходом их в новые квантовые состояния. Очевидно, такие переходы могут осуществляться лишь в том случае, если в энергетической зоне имеются свободные уровни.

Теперь представим себе, что в валентной зоне заняты все состояния, кроме одного, характеризующегося волновым вектором k_i и скоростью \vec{V} .

Суммарный ток в такой зоне равен

$$i_{\text{рез}} = -e * \sum_{S \neq i} V_S = -e * \sum_S V_S + e * V_i, \quad (5.3)$$

Так как первое слагаемое правой части равно 0, то

$$i_{\text{рез}} = e * V_i. \quad (5.4)$$

Таким образом, суммарный ток всех электронов валентной зоны, имеющей одно вакантное состояние, эквивалентен току, обусловленному одной частицей с положительным зарядом $+e$, помещенной в это состояние. Такие фиктивные частицы и называются дырками. Из-за действия внешнего поля их эффективная масса должна быть величиной положительной. По абсолютному значению она равна эффективной массе e , ранее занимавшего данное вакантное состояние.

5.4. Примесные уровни в полупроводниках

Полупроводники любой степени чистоты содержат примесные атомы, создающие свои собственные энергетические уровни, получившие название примесных уровней.

Эти уровни могут располагаться как *в разрешенной*, так и *в запрещенной зоне* полупроводника на различных состояниях от вершины валентной зоны и от дна зоны проводимости.

Иногда примеси вводят специально для придания полупроводнику необходимых свойств.

Рассмотрим основные типы примесных уровней.

1. Донорные уровни.

Предположим, в кристалле Ge часть родных атомов замещена атомами 5 валентного мышьяка (рис. 5.4). Германий имеет решетку типа алмаза, в которой каждый атом окружен четырьмя ближайшими соседями. Для установления связи с этими соседями атом мышьяка расходует 4 валентных электронов, а 5-й электрон в образовании связи не участвует. Он продолжает двигаться в поле атома мышьяка, ослабленного в Ge в 16 раз ($\epsilon = 16$ – диэлектрическая проницаемость Ge). Вследствие ослабления поля радиус орбиты электрона увеличивается в 16 раз, а энергия связи его с атомом уменьшается примерно в $\epsilon^2 \approx 256$ раз и становится равной $E_D \approx 0,05$ эВ. При сообщении электрону такой энергии он отрывается от атома и приобретает способность свободно перемещаться в решетке Ge, превращаясь в *электрон проводимости*.

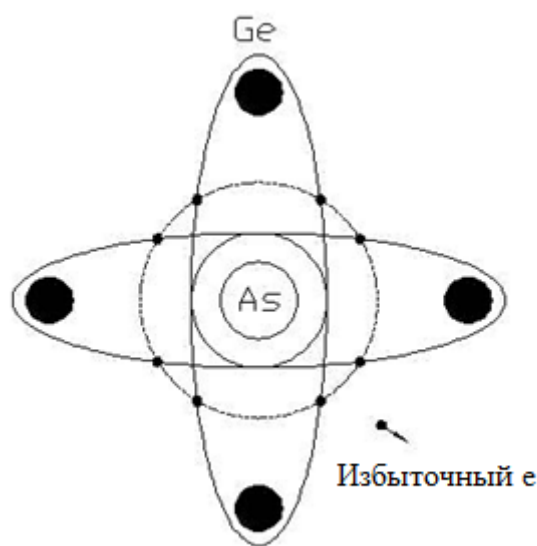


Рис. 5.4. Примесный атом мышьяка в кристалле германия

Образующиеся при этом *положительные заряды* (дырки) локализуются и в электропроводности не участвуют. Примеси, являющиеся источником электронов проводимости, называются *донорами*, а энергетические уровни этих примесей *донорными уровнями*.

2. Акцепторные уровни.

Предположим, что в решетке Ge часть атомов замещена атомами трехвалентного индия. Для образования связей с четырьмя ближайшими атомами Ge у атома In не хватает одного электрона. Его можно «заимствовать» у атома Ge. Расчет показывает, что для этого требуется затрата энергии порядка $E_a \approx 0,01$ эВ. Разорванная связь представляет собой *дырку*, так как она отвечает образованию в валентной зоне Ge вакантного состояния.

На расстоянии 0,01 эВ от валентной зоны располагаются незаполненные уровни атомов In. Близость этих уровней к валентной зоне приводит к тому, что уже при относительно низких температурах электроны из валентной зоны переходят на примесные уровни (рис. 5.5).

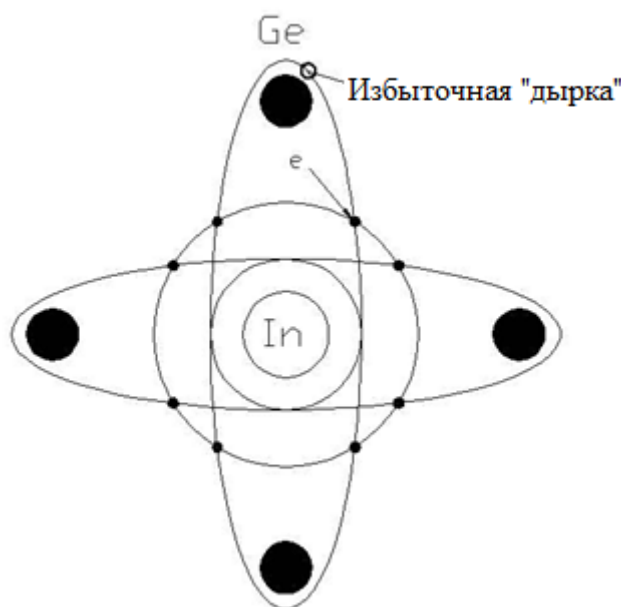


Рис. 5.5. Примесный атом индия в кристалле германия

Связываясь с атомами In, они теряют способность перемещаться в решетке Ge и в проводимости не участвуют. Свободными носителями заряда являются лишь дырки, возникающие в валентной зоне Ge.

Примеси, захватывающие электроны из валентной зоны полупроводника, называются *акцепторными примесями*, а энергетические уровни этих примесей *акцепторными уровнями*.

Наглядное отличие акцепторных уровней от донорных можно увидеть на рис. 5.6. Тип кристалла *n* или *p* всего лишь означает тип преимущественных или основных носителей заряда: *n* – это электроны, а *p* – это дырки.

Более подробно об электронной и дырочной проводимости, рекомбинации и сопутствующих эффектах поговорим в последующих темах.

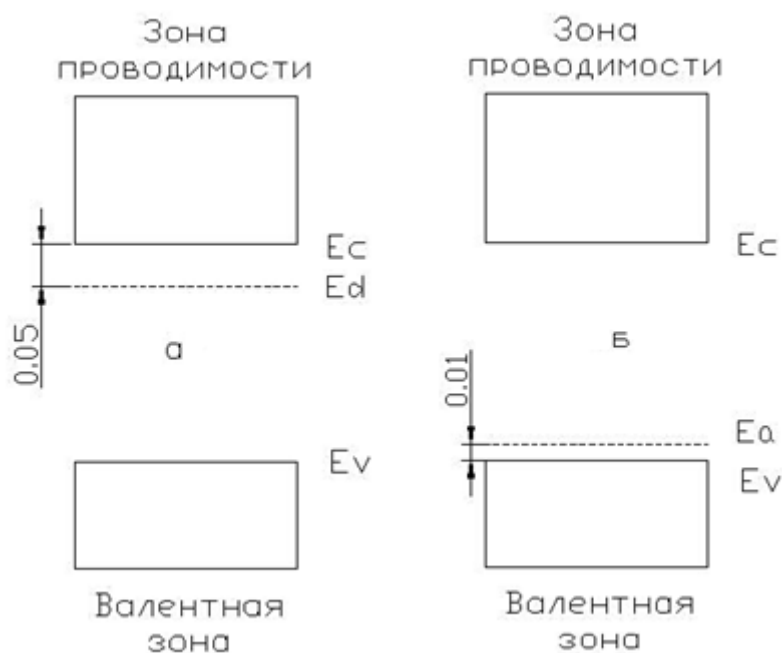


Рис. 5.6. Энергетические зоны для донорного уровня в кристалле n-типа (а) и акцепторного уровня в кристалле p-типа (б)

5.5. Уровни прилипания

Донорные и акцепторные уровни располагаются на небольшом расстоянии от своих зон. Поэтому их называют мелкими уровнями. Дефекты дают локальные уровни в запрещенной зоне. К мелким уровням еще относятся уровни прилипания, или, как говорят, уровни захвата. Они также *располагаются вблизи границ энергетических зон и обмениваются с этими зонами носителями заряда.*

Обмен состоит в том, что электрон зоны проводимости, захваченный ловушкой, расположенной вблизи дна зоны, не остается на длительное время на этом уровне, а вследствие теплового возбуждения вновь перебрасывается в зону проводимости (рис. 5.7, а). Аналогичный обмен дырками происходит между валентной зоной и ловушками, расположенными вблизи вершины этой зоны (рис. 5.7, б).

Наличие в полупроводнике уровней прилипания может существенно увеличить время жизни неравновесных носителей заряда.

Некоторые примеси создают в полупроводнике примесные уровни, расположенные далеко от границ энергетических зон. Такие уровни называют глубокими.

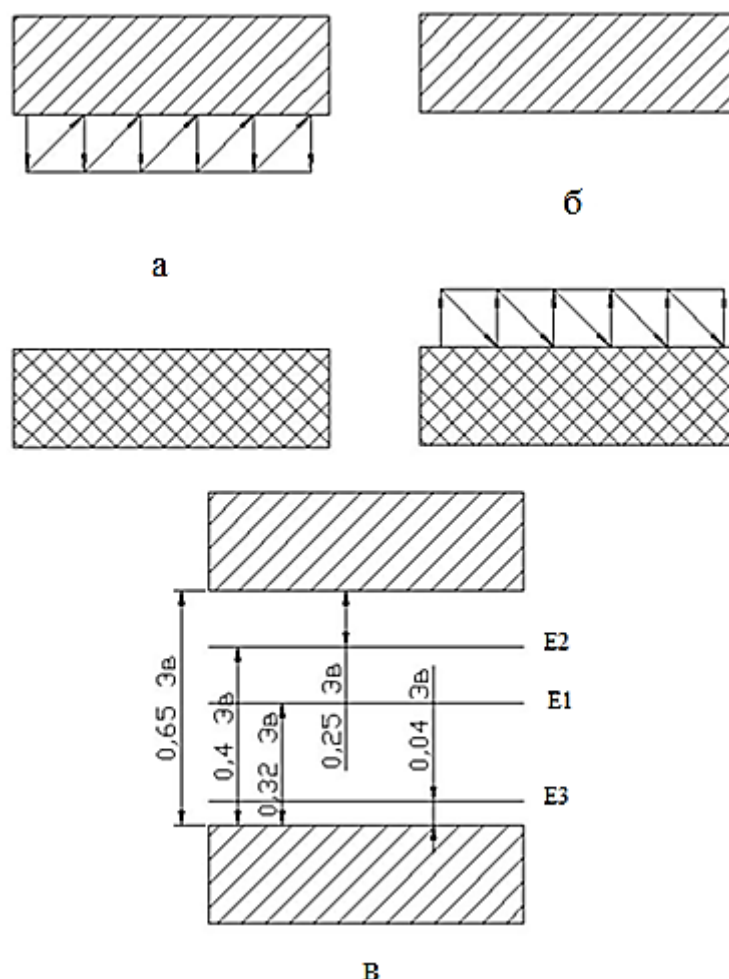


Рис. 5.7. Обмен между зонами электронами (а), дырками (б) и значения энергий глубоких примесных уровней Cu в Ge (в)

На рис. 5.7, в показаны примесные уровни Cu в Ge. Один из них $E_1 = 0,32$ эВ расположен практически в середине запрещенной зоны, второй, E_2 , ближе к зоне проводимости, а третий – E_3 вблизи потолка валентной зоны.

Уровни E_1 и E_2 являются глубокими, а E_3 – мелким.

Кроме Cu, глубокие уровни в Ge и Si создают атомы золота, железа, никеля и т.д. Эти уровни играют большую роль в протекании процессов рекомбинации неравновесных носителей заряда.

ТЕМА 6. Статистика носителей зарядов в кристалле

В предыдущих лекциях мы установили, что характер заполнения зон электронами определяет электрические свойства твердых тел и деление их на проводники, диэлектрики и полупроводники.

Поэтому одним из основных является вопрос о заполнении зон электронами, о распределении электронов в зоне по энергетическим уровням или состояниям.

Для решения этого вопроса необходимо знать:

1. Как распределены сами состояния по энергиям в зоне, т.е. какое число состояний $g(E)dE$ заключено в интервале от E до $E + dE$.
2. Чтобы определить число электронов, которое находится в этих состояниях, необходимо знать *среднюю степень заполнения* этих состояний электронами.

6.1. Функция распределения и полная функция распределения электронов по состояниям

Среднюю степень заполнения состояний электронами обозначают через $f(E)$. Если на 100 состояний, близко расположенных, приходится 10 \bar{e} , то $f(E) = 0,1$. Поскольку на каждое состояние приходится в среднем 0,1 частицы, то $f(E)$ можно трактовать как *среднее число частиц*, находящихся в данном состоянии. Функцию $f(E)$ называют *функцией распределения*.

Зная число состояний $g(E)dE$, заключенное в интервале энергий между E и $E + dE$, и степень заполнения этих состояний электронами $f(E)$, можно определить число электронов $N(E)dE$, которые заполняют эти состояния:

$$N(E)dE = f(E) * g(E)dE . \quad (6.1)$$

Функция $N(E)$ называется *полной функцией распределения электронов по состояниям*.

Таким образом, задача определения $N(E)$ сводится к нахождению функции $g(E)$, описывающей распределение состояний по энергиям, и функции распределения $f(E)$, определяющей степень заполнения этих состояний электронами.

Определим вначале функцию $g_{(E)}$.

Состояние электрона в каждой зоне разрешенных энергий определяется его волновым вектором \vec{k} . Если зона образована из невырожденного атомного уровня, она содержит N состояний и для одномерного кристалла простирается от $k = -\frac{\pi}{a}$ до $k = +\frac{\pi}{a}$ (протяженность $\frac{2\pi}{a}$ – первая зона Бриллюэна). Для трехмерного кристалла (кубического) объем первой зоны Бриллюэна равен $\frac{8\pi^3}{a^3}$.

Разрешенные значения вектора \vec{k} распределены в \vec{k} -пространстве равномерно, так что объем \vec{k} -пространства, приходящийся на одно состояние в зоне, равен

$$\Delta \Gamma = \frac{8\pi^3}{a^3 * N} = \frac{8\pi^3}{V}, \quad (6.2)$$

где V – объем кристалла.

Рассмотрим теперь распределение разрешенных состояний по энергиям. Это легко сделать, если известен вид зависимости $E_{(k)}$, в частности, для состояний, располагающихся у дна зоны проводимости и у потолка валентной зоны (рис. 6.1).

Энергия электрона, располагающегося у дна зоны проводимости, отсчитанная от этого дна:

$$E_{(k)} = \frac{\hbar^2 * k^2}{2 * m_n^*}, \quad (6.3)$$

где m_n^* – эффективная масса таких электронов. Отсюда можно найти \vec{k} и dk , соответствующие энергиям E и dE :

$$k = \frac{\sqrt{E * 2 * m_n^*}}{\hbar}, \quad dk = \frac{\sqrt{2 * m_n^*}}{\hbar} * \frac{dE}{2 * \sqrt{E}}. \quad (6.4)$$

Проведем теперь в \vec{k} -пространстве сферы радиусами k и $k + dk$ (рис. 6.2). Между этими сферами находится слой, объемом $\Gamma_{\text{слоя}} = 4 * \pi * k^2 dk$; подставив значения \vec{k} и dk из (6.4), получим

$$\Gamma_{\text{слоя}} = \frac{2 * \pi}{\hbar^3} * (2 * m_n^*)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E} dE. \quad (6.5)$$

Поделив этот объем на элементарный объем из формулы (6.2), приходящийся на одно разрешенное состояние, получим число состояний, заключенное в интервале энергий dE :

$$g_{(E)} dE = \frac{V}{4 * \pi^2 * \hbar^3} * (2 * m_n^*)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E} dE. \quad (6.6)$$

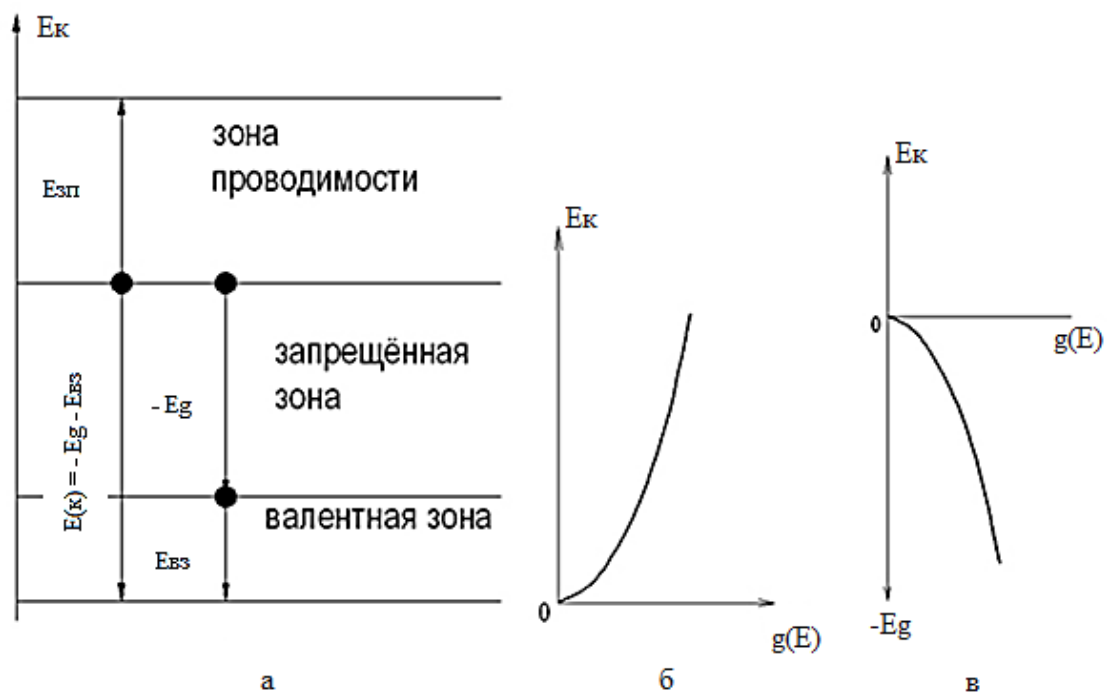


Рис. 6.1. Зависимость числа состояний в единичном интервале энергий от энергии: общая схема (а), у дна зоны проводимости (б) и у вершины валентной зоны (в)

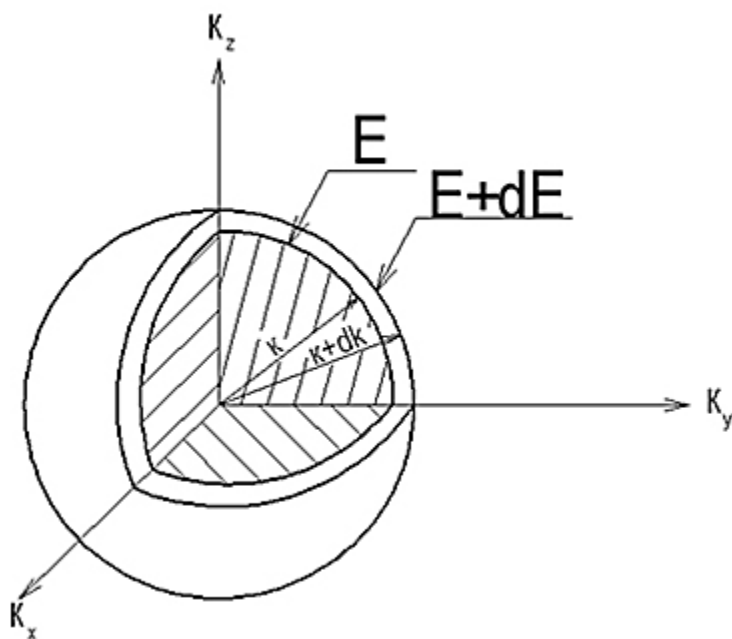


Рис. 6.2. Схема \vec{k} -пространства

Следует учесть, что каждому разрешенному состоянию \vec{k} отвечает не одно, а два состояния электрона, отличающиеся направлением спина.

Поэтому следует удвоить выражение (6.6) для $g_{(E)}dE$, а также вместе с подстановкой $h = 2\pi\hbar$, получим

$$g_{(E)}dE = \frac{4\pi V}{h^3} * (2 * m_n)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E}dE. \quad (6.7)$$

Функцию $g_{(E)}$, выражающую число состояний, заключенных в единичном интервале энергий, называют *плотностью состояний*.

Для электронов, располагающихся у дна зоны проводимости, график функции $g_{(E)}$ представлен на рис. 6.1, б.

У вершины валентной зоны энергия электрона $E_{(k)}$, отсчитанная от дна зоны проводимости E_c (рис. 6.1, а), является отрицательной величиной и равна

$$E_{(k)} = -E_g - \frac{\hbar^2 * k^2}{2 * m_p}. \quad (6.8)$$

Подставив в выражение Г слоя значения k и dk , соответствующие энергиям E и dE , найденные из выражения (6.4), получим выражение для $g_{(E)}dE$ состояний, располагающихся у потолка валентной зоны:

$$g_{(E)}dE = \frac{4\pi V}{h^3} * (2 * m_p)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{-E_g - E}dE. \quad (6.9)$$

Подкоренное выражение $(-E_g - E)$ положительно, так как ширина запрещенной зоны $|E_g| < |E|$; зависимость $g_{(E)}$ вблизи вершины валентной зоны представлена отрезком параболы (рис. 6.1, в).

6.2. Вырожденные и невырожденные коллективы

По характеру поведения в коллективе все микрочастицы можно разделить на две группы: *фермионы и бозоны*.

К *фермионам* относятся электроны, дырки и другие частицы с полуцелым спином $\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar$ и т.д. Фермионы в коллективе проявляют ярко вырожденное стремление к «уединению». Если данное квантовое состояние уже занято фермионом, то никакой другой фермион другого типа не может попасть в это состояние. В этом состоит *принцип Паули*, которому подчиняются фермионы. Они неразличимы, их энергетический спектр дискретен.

К *бозонам* относятся фотоны, фононы и другие частицы, обладающие целочисленным спином: $0, \hbar, 2\hbar$ и т.д. Бозоны в коллективе стремятся к объединению. Они могут неограниченно заселять одно и то же

состояние, причем делают это тем «охотнее», чем их больше в этом состоянии.

Посмотрим, как влияет специфика микрочастиц на свойства коллектива как целого.

Для проявления этого влияния необходимо, чтобы микрочастицы «встречались» друг с другом достаточно часто, т.е. попадали в одно и то же энергетическое состояние. Если коллектив состоит из N частиц и эти частицы могут занимать G квантовых состояний, то мерой «частоты» таких встреч может служить отношение $\frac{N}{G}$.

Микрочастицы будут редко встречаться, если $N \ll G$, т.е. выполняется условие $\frac{N}{G} \ll 1$. В этом случае свойства коллектива не будут зависеть от специфики микрочастиц, из которых он состоит. Такие коллективы *невыврожденные*, выражение $\frac{N}{G} \ll 1$ – условие не вырожденности коллектива.

При $N \approx G$, т.е. при условии $\frac{N}{G} \approx 1$, заселение состояний поодиночке или коллективно определяется в значительной мере спецификой микрочастиц. Такие коллективы *вырожденные*.

Статистика, изучающая свойства невырожденных коллективов, называется классической статистикой *Максвелла – Больцмана*.

Физическую статистику, изучающую свойства вырожденных коллективов, называют *квантовой статистикой*. Причем, учитывая различия между вырожденным коллективом фермионов и вырожденным коллективом бозонов, различают *статистику Ферми – Дирака* (фермионы), *статистику Бозе – Эйнштейна* (бозоны).

6.3. Функция распределения Ферми – Дирака

Рассмотрим функцию распределения вырожденных фермионов, например для *вырожденного электронного газа*. Она выражает вероятность того, что состояние с энергией E занято электроном и имеет вид

$$f_{\Phi(E)} = \frac{1}{e^{\frac{(E-\mu)}{k*T}} + 1}. \quad (6.10)$$

В выражении (6.10) параметр μ называется химическим потенциалом газа или уровнем Ферми.

При $E = \mu$ функция распределения $f_{\Phi(E)} = \frac{1}{2}$ при любой температуре. Поэтому со статистической точки зрения уровень Ферми представляет собой энергетический уровень, вероятность заполнения которого равна $\frac{1}{2}$. Положения этого уровня определяется отдельно для каждой конкретной системы.

Если в (6.10) $T = 0 \text{ K}$, то

$$\begin{aligned} f_{\Phi(E)} &= 0 \text{ при } E > \mu, \\ f_{\Phi(E)} &= 1 \text{ при } E < \mu. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Это значит, что все состояния с энергией, меньшей μ , оказываются занятыми электронами, а с энергией, большей μ , полностью свободными (рис. 6.3, а).

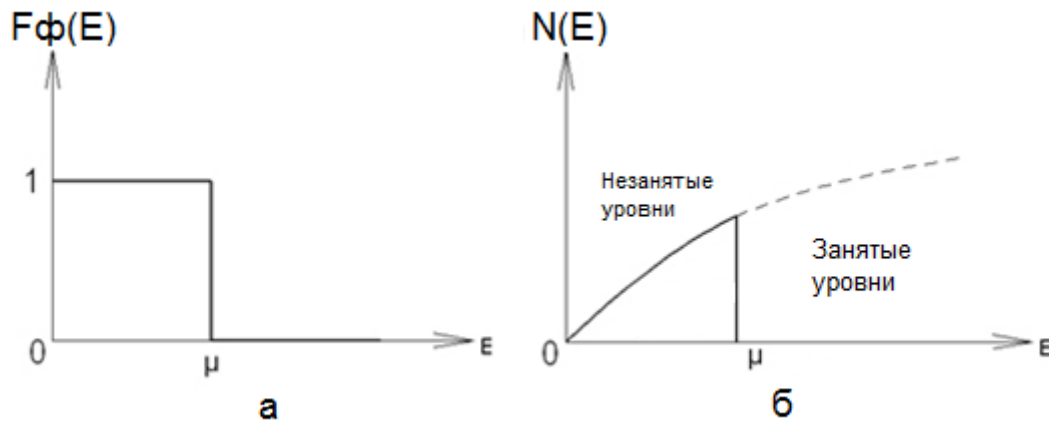


Рис. 6.3. Функция распределения Ферми – Дирака при $T = 0$ (а) и распределение фермионов по уровням (б)

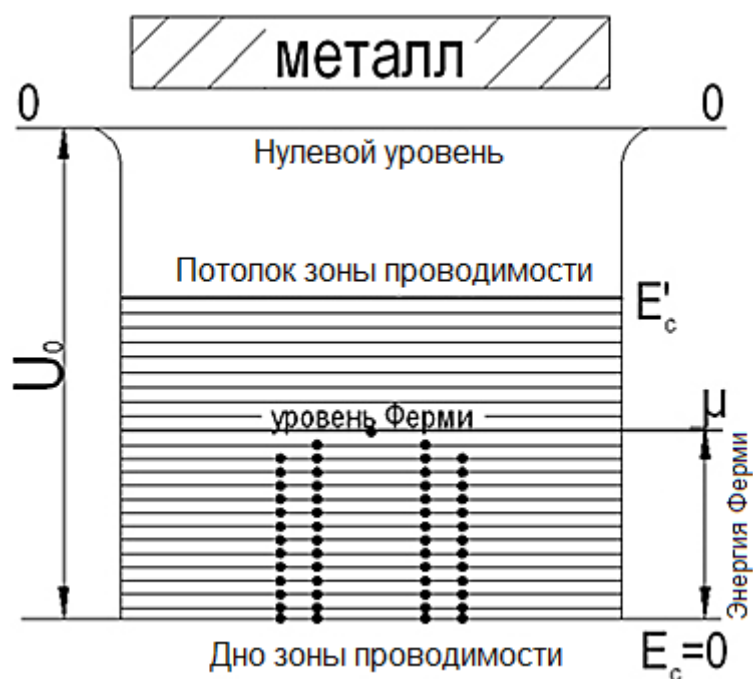


Рис. 6.4. Энергетическая схема зоны проводимости

При $T = 0$ все уровни, лежащие ниже уровня Ферми μ , заполнены электронами. Вероятность заполнения уровня Ферми равна $\frac{1}{2}$. Уровни выше μ свободны.

На рис. 6.4 показана энергетическая схема зоны проводимости в виде потенциальной ямы, выход из которой требует затрат энергии на преодоление сил связи, удерживающих электроны в металле. Горизонтальными линиями показаны энергетические уровни, которые могут занимать электроны. В соответствии с принципом Паули, на каждом уровне могут разместиться не более двух электронов с противоположными спинами. Если зона проводимости содержит N электронов, то последним занятым уровнем окажется $\frac{1}{2} N$ -й. Этот уровень и представляет собой уровень Ферми в металле. Он соответствует максимальной кинетической энергии, которой может обладать электроны в металле при абсолютном нуле. Эта энергия называется энергией Ферми.

Для типичных металлов энергия Ферми μ , отсчитанная от дна зоны проводимости, измеряется электрон-вольтами (эВ).

Например, для Cu $\mu = 7$ эВ. Максимальная скорость движения электронов при $T = 0$ K составляет $V_{max} = 10^6 \frac{м}{с}$.

С повышением t электроны подвергаются тепловому возбуждению и переходят на более высокие энергетические уровни, вследствие чего меняется характер распределения их по состояниям.

Однако в интервале t , в котором энергия теплового движения kT остается значительно ниже энергии Ферми μ , тепловому возбуждению могут подвергаться электроны лишь узкой полосы kT , непосредственно расположенной у уровня Ферми. Электроны более глубоких уровней остаются практически незатронутыми, так как энергия теплового движения kT недостаточна для их возбуждения (переноса e за уровень Ферми).

В результате теплового возбуждения часть электронов, имевших энергию ниже μ , переходит на уровни с энергией выше μ и устанавливается новое их распределение по состояниям:

$$\mu_{(T)} = \mu_0 * \left[1 - \frac{\pi^2}{12} * \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (6.12)$$

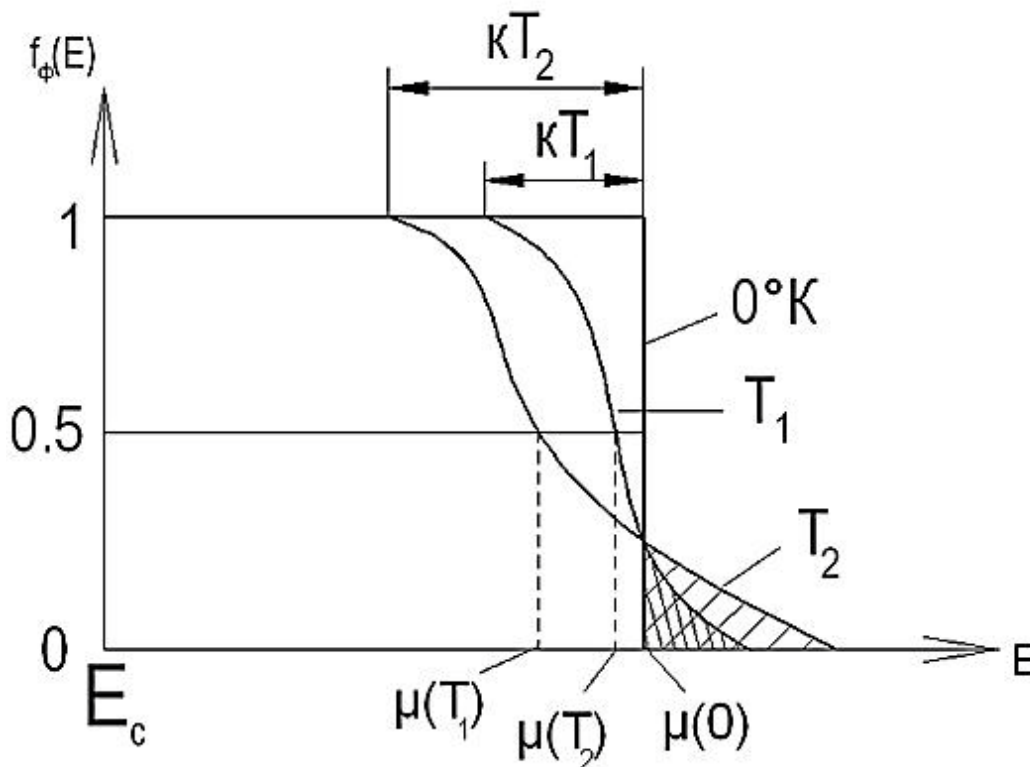


Рис. 6.5. Влияние температуры на распределение фермионов

В этом случае μ снижается, но незначительно, можно этим коэффициентом пренебречь. Поэтому и средняя энергия, и средняя скорость электронов в металле практически не зависят от t .

6.4. Статистика Максвелла – Больцмана и невырожденный электронный газ

Рассмотрим теперь вопрос о положении уровня Ферми в собственном (т.е. беспримесном) полупроводнике. Как уже отмечалось ранее, при $T > 0\text{ K}$ в зоне проводимости полупроводника появляется относительно небольшое количество электронов, возбужденных из валентной зоны.

Поскольку число электронов мало, то средняя плотность заполнения уровней в зоне проводимости будет много меньше 1, поэтому электроны в зоне проводимости полупроводника образуют невырожденный газ:

$$f_{(E)} = \frac{N}{G} \ll 1. \quad (6.13)$$

Функция Ферми – Дирака (6.10) будет существенно меньше 1, если слагаемое $e^{\frac{(E-\mu)}{k*T}}$, стоящее в знаменателе этой функции, окажется значительно больше 1

$$e^{\frac{(E-\mu)}{k*T}} \gg 1. \quad (6.14)$$

Это неравенство должно выполняться для всех состояний кристалла, в том числе и для состояний, отвечающих дну зоны, где $E = E_c = 0$ (см. рис. 6.4)

$$e^{\frac{-\mu}{k*T}} \gg 1. \quad (6.15)$$

Из этого неравенства следует, что для невырожденного электронного газа, удовлетворяющего критерию $\frac{N}{G} \ll 1$, $(-\mu)$ должен быть величиной положительной и существенно большей kT

$$-\mu \gg kT, \quad (6.16)$$

а также химический потенциал μ должен быть величиной *отрицательной* и по абсолютной величине больше kT . Это означает, что уровень Ферми у невырожденного электронного газа располагается ниже дна зоны проводимости, как показано на рис. 6.6.

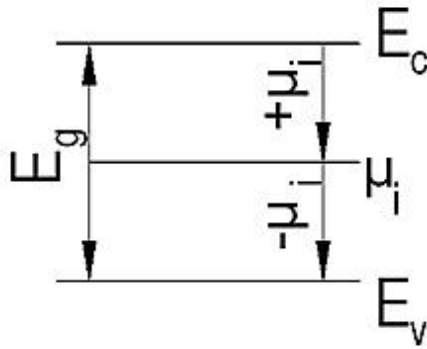


Рис. 6.6. Положение уровня Ферми у невырожденного электронного газа

При выполнении условия невырожденности $f_{(E)} = \frac{N}{G} \ll 1$ единиц в знаменателе функции Ферми – Дирака можно пренебречь, получится выражение функции распределения невырожденного газа:

$$f_{B(E)} = e^{\frac{\mu}{kT}} * e^{\frac{-E}{kT}}. \quad (6.17)$$

Эта функция называется *функцией Максвелла – Больцмана*. Она имеет максимальное значение при $E = 0$ и асимптотически снижается до 0 при $E \rightarrow \infty$ (рис. 6.7, а).

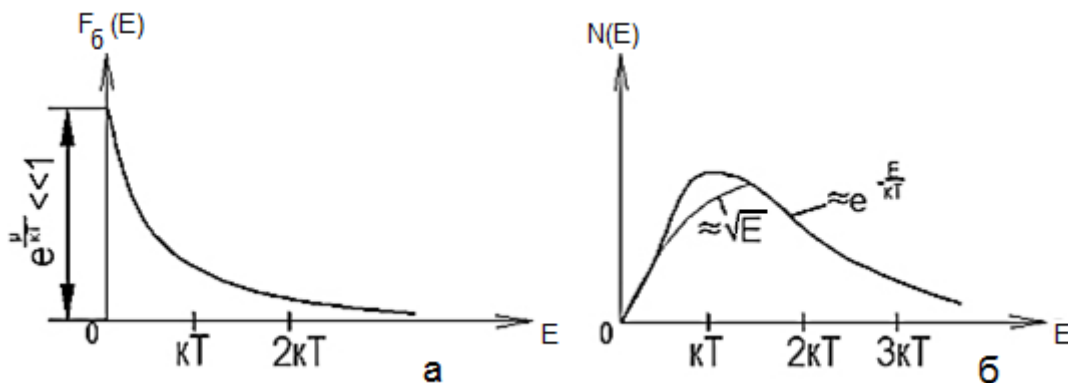


Рис. 6.7. График функции распределения для невырожденного e -газа: средняя плотность заполнения состояний частицами (а) и полная функция распределения (б)

Таким образом, наибольшую вероятность заполнения имеют состояния с низкими энергиями. По мере повышения E плотность заполнения состояний уменьшается.

6.5. Невырожденные полупроводники

Нам уже известно, что невырожденное состояние электронного газа возникает в случае, когда концентрация газа оказывается значительно

меньше числа состояний, которые могут занимать электроны, образующие электронный газ.

Этот практически важный случай реализуется в собственных и слаболегированных полупроводниках. Такие полупроводники называются невырожденными.

Уровень Ферми у невырожденного полупроводника располагается в запрещенной зоне на расстоянии, по крайней мере, нескольких kT ниже дна зоны проводимости у полупроводников n -типа (рис. 6.8, а) и выше потолка валентной зоны у полупроводников p -типа (рис. 6.8, б).

Концентрацию электронного газа в зоне проводимости невырожденного полупроводника можно найти по выражению

$$n = \frac{2 \cdot (2 \cdot \pi \cdot m_n \cdot k \cdot T)^{3/2}}{h^3} e^{\frac{\mu}{k \cdot T}}. \quad (6.18)$$

Обозначим первый сомножитель через N_c , тогда

$$n = N_c \cdot e^{\frac{\mu}{k \cdot T}}, \quad (6.19)$$

где N_c – эффективное число состояний электронов в зоне проводимости, приведенное к дну зоны.

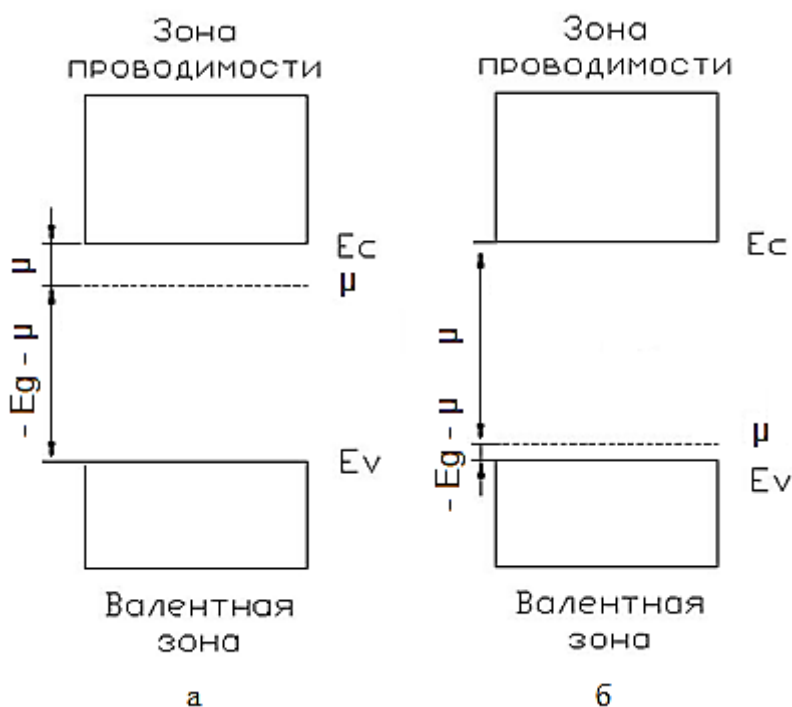


Рис. 6.8. Расположение уровня Ферми в невырожденном полупроводнике n -типа (а) и p -типа (б)

Концентрацию дырок в валентной зоне вырожденного полупроводника можно найти по выражению

$$p = N_v * e^{\frac{-E_g - \mu}{k*T}}, \quad (6.20)$$

где N_v представляет собой *эффективное число состояний дырок* в валентной зоне, приведенное к вершине валентной зоны.

6.6. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в собственных полупроводниках

Возбуждение собственных носителей в собственных полупроводниках происходит путем перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости. При этом образуются одновременно два носителя: электрон в зоне проводимости и дырка в валентной зоне. Поэтому в собственном полупроводнике концентрация электронов проводимости n_i равна концентрации свободных дырок p_i :

$$n_i = p_i. \quad (6.21)$$

Согласно ранее упоминавшимся формулам для собственных полупроводников имеем

$$n_i = N_c * e^{\frac{\mu_i}{k*T}}, \quad (6.22)$$

$$p_i = N_v * e^{\frac{-E_g - \mu_i}{k*T}}. \quad (6.23)$$

Приравняв (6.22) и (6.23) и решив относительно μ (уровня Ферми в собственном полупроводнике), получим

$$\mu_i = -\frac{E_g}{2} + \frac{k*T}{2} * \ln \frac{N_v}{N_c}. \quad (6.24)$$

Подставив значения N_v и N_c ,

$$\text{где } N_v = \frac{2*(2*\pi*m_p^*K*T)^{3/2}}{h^3}, N_c = \frac{2*(2*\pi*m_n^*K*T)^{3/2}}{h^3},$$

получим

$$\mu_i = \frac{-E_g}{2} + \frac{3*K*T}{4} * \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (6.25)$$

Из формул (6.24) и (6.25) следует, что у невырожденных собственных полупроводников уровень Ферми при $T = 0 \text{ K}$ располагается посередине запрещенной зоны $\mu_i = \frac{-E_g}{2}$.

Влияние температуры сказывается на положении уровня Ферми в собственных полупроводниках из-за того, что $m_n \neq m_p$. В случае, когда $m_n = m_p$, этого влияния не было бы (рис. 6.9, прямая 1).

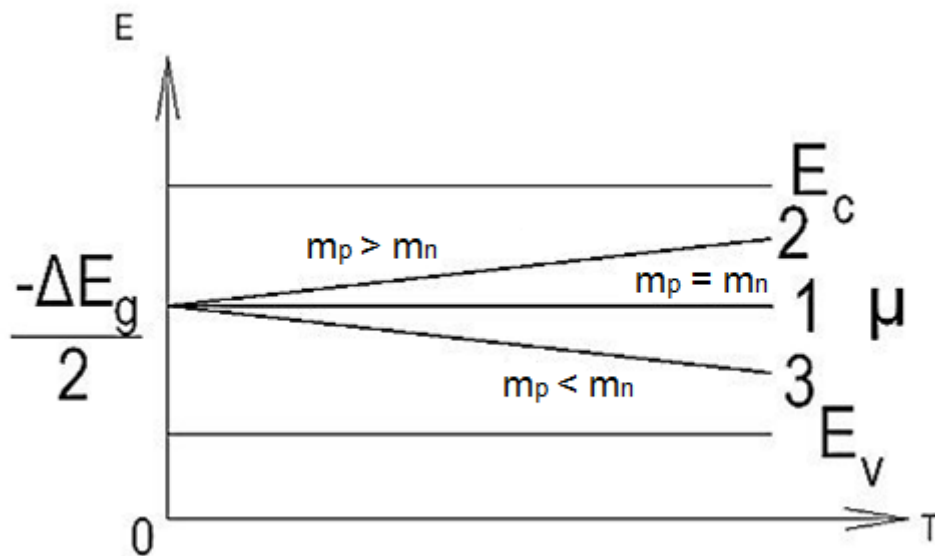


Рис. 6.9. Влияние температуры на положение уровня Ферми при:

$$1 - m_n = m_p; 2 - m_n < m_p; 3 - m_n > m_p$$

При $m_n < m_p$ уровень Ферми должен смещаться вверх к дну зоны проводимости (рис. 6.9, прямая 2), а при $m_n > m_p$ – вниз к потолку валентной зоны (рис. 6.9, прямая 3).

Однако для многих полупроводников это смещение столь незначительно, что им пренебрегают. Но у ряда полупроводников, например у *InSb*, этим изменением уровня Ферми при изменении температуры пренебрегать нельзя.

Равновесная концентрация носителей в собственном полупроводнике определяется по формуле

$$n_i = p_i = (N_v * N_c)^{1/2} * e^{\frac{-E_g}{2*k*T}}. \quad (6.26)$$

6.7. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в примесных невырожденных полупроводниках дырочного типа (так называемые доноры однозарядные)

Для области *низких температур* генерация свободных носителей заряда происходит практически полностью за счет *ионизации донорных атомов*, энергия возбуждения которых примерно на два порядка ниже энергии возбуждения собственных атомов полупроводника. Поэтому концентрацией собственных носителей можно пренебречь и концентрацию *электронов* в зоне проводимости определить формулой

$$n_D = N_c * e^{\frac{\mu}{k*T}}. \quad (6.27)$$

Концентрацию ионизированных доноров ($N_D - n_D$), т.е. концентрацию дырок, – по формуле

$$p_D = N_v * e^{\frac{-E_g - \mu}{k*T}}. \quad (6.28)$$

Причем E_g следует в этой формуле заменить величиной E_D , так как источником электронов является не валентная зона, а донорные уровни E_D , отстоящие от дна зоны проводимости на расстояние E_D (рис. 6.10).

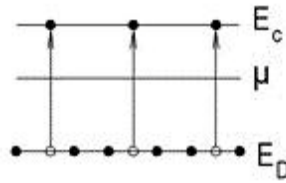


Рис. 6.10. Равновесный уровень Ферми в невырожденном полупроводнике донорного типа при $T = 0\text{K}$

Учитывая это, получим

$$N_c * e^{\frac{\mu}{k*T}} = N_D * e^{\frac{-E_D - \mu}{k*T}}, \quad (6.29)$$

откуда находим μ :

$$\mu_i = \frac{-E_g}{2} + \frac{k*T}{2} * \ln \frac{N_D}{N_c} = \frac{-E_g}{2} + \frac{k*T}{2} * \ln \left(\frac{N_D * h^3}{2 * (2 * \pi * m_n * K * T)^{3/2}} \right). \quad (6.30)$$

Из формулы (6.30) видно, что при абсолютном нуле $\mu_i = \frac{-E_D}{2}$, т.е. равновесный уровень Ферми располагается между дном зоны проводимости и донорным уровнем (рис. 6.10).

Оценим влияние температуры на положение уровня Ферми. Рассмотрим график на рис. 6.11, его можно разбить на три участка:

- 1 – область слабой ионизации;
- 2 – область истощения примеси;
- 3 – область собственной проводимости.

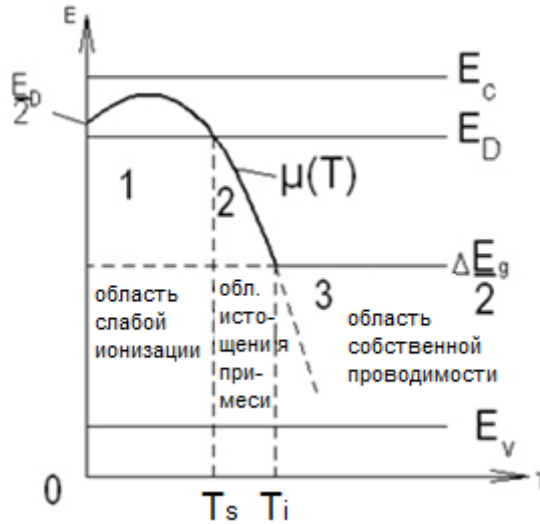


Рис. 6.11. Влияние температуры на положение уровня Ферми в примесных невырожденных полупроводниках донорного типа

1. Область слабой ионизации.

Второй член в формуле (6.30) с увеличением t меняет знак. В области низких температур пока выполняется неравенство

$$N_D * h^3 > 2 * (2 * \pi * m_n * K * T)^{\frac{3}{2}}, \quad (6.31)$$

это выражение положительно.

В области более высоких температур, при которых

$$N_D * h^3 < 2 * (2 * \pi * m_n * K * T)^{\frac{3}{2}}, \quad (6.32)$$

оно отрицательно. Поэтому уровень Ферми сначала поднимается вверх к дну зоны проводимости, а затем начинает опускаться и при $t = T_s$ пересекает донорные уровни E_D (рис. 6.11, область 1).

2. Область истощения примеси.

Вторая область указывает, что по мере повышения t концентрация электронов на примесных уровнях уменьшается – примесные уровни истощаются. Температуру T_s можно определить по формуле

$$T_s = \frac{E_D}{k * \ln \frac{2 * N_C}{N_D}}. \quad (6.33)$$

К примеру, для Ge при $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$ и $E_D = 0,01 \text{ эВ}$ температура истощения примеси $T_s = 32 \text{ К}$. Выше температуры T_s уровень Ферми (как было видно из рис. 6.11, область 2) понижается примерно линейно с ростом температуры, а концентрация электронов в зоне проводимости сохраняется практически неизменной.

3. Область собственной проводимости.

При высоких температурах, когда происходит столь сильное возбуждение собственных атомов решетки, что концентрация собственных носителей начинает значительно превосходить концентрацию «примесных» носителей $n_i \gg n_{\text{примесн}} = N_D$, можно считать концентрацию электронов в зоне проводимости примерно равной концентрации дырок в валентной зоне $n \approx n_i = p_i$. Уровень Ферми в этом случае и концентрация носителей определяются формулами для собственных полупроводников.

Температура перехода к собственной проводимости T_i определяется по формуле

$$T_i = \frac{E_g}{k \cdot \ln \frac{N_C \cdot N_V}{N_D^2}}. \quad (6.34)$$

Чем шире запрещенная зона и больше концентрация примеси, тем выше T_i .

Например, для Ge при $N_D = 10^{23} \text{ м}^{-3}$, $E_g = 0,65 \text{ эВ}$ температура перехода по формуле (6.34) равна $T_i = 450 \text{ K}$.

6.8. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в примесных полупроводниках акцепторного типа

По аналогии, разобьем график зависимости положения уровня Ферми в полупроводниках акцепторного типа (рис. 6.12) от температуры на три области (см. рис. 6.13):

- 1 – область низких температур;
- 2 – область истощения примеси;
- 3 – область перехода к собственной проводимости.

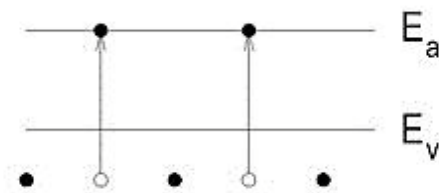


Рис. 6.12. Зонная схема полупроводника акцепторного типа

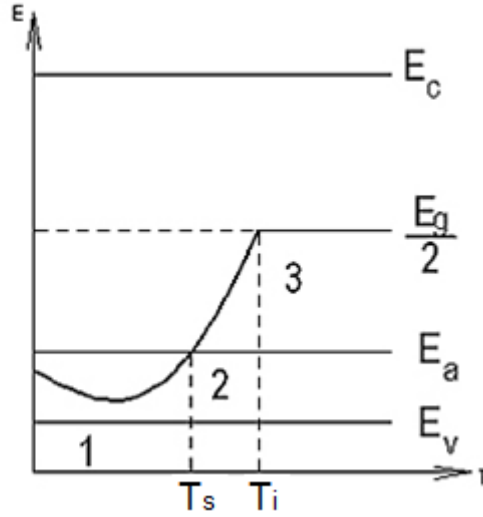


Рис. 6.13. Влияние температуры на положение уровня Ферми в примесных невырожденных полупроводниках акцепторного типа

1. Область низких температур.

При условии отсутствия собственной проводимости

$$\mu = -E_g + \frac{E_a}{2} - \frac{k*T}{2} * \ln \frac{N_a}{N_v}, \quad (6.35)$$

$$p = (N_a * N_v)^{\frac{1}{2}} * e^{-\frac{E_a}{2*k*T}} = \sqrt{2 * N_a} * \left(\frac{2*\pi*m_p*k*T}{h^3} \right)^{\frac{3}{4}} * e^{-\frac{E_a}{2*k*T}}. \quad (6.36)$$

2. Область истощения примеси:

$$\mu = -E_g - k * T * \ln \frac{N_a}{N_v}. \quad (6.37)$$

$$p = N_a$$

$$T_s = \frac{E_a}{k * \ln \frac{2*N_v}{N_a}}. \quad (6.38)$$

3. Область перехода к собственной проводимости:

$$\mu \approx \mu_i = -\frac{E_g}{2} + \frac{k*T}{2} * \ln \frac{N_v}{N_c}. \quad (6.39)$$

$$p = p_i = n_i$$

$$T_i = \frac{E_g}{k * \ln \frac{N_c * N_v}{N_a^2}}. \quad (6.40)$$

6.9. Реальные полупроводники, содержащие донорную и акцепторную примеси

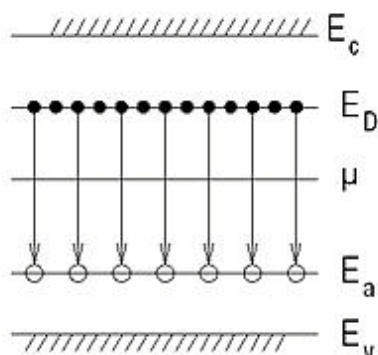


Рис. 6.14. Зонная схема реального полупроводника

Поскольку электроны стремятся занять наименьшие энергетические уровни, то они уже при $T = 0\text{ K}$ переходят с донорных на акцепторные атомы.

Если концентрация доноров N_D больше, чем акцепторов N_a , то все акцепторные уровни оказываются занятыми электронами с донорных центров и не могут принять на себя электроны из валентной зоны. В то же время оставшиеся $(N_D - N_a)$ доноры могут отдать свои электроны в зону проводимости, так что в целом такой полупроводник будет иметь проводимость n -типа. Произойдет компенсация акцепторов донорами. Такой полупроводник является частично компенсированным донорным полупроводником.

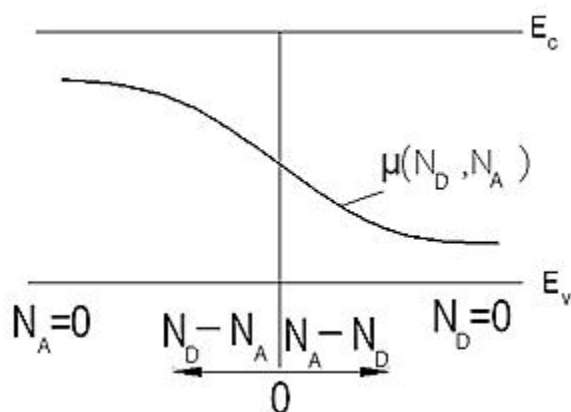


Рис. 6.15. Влияние концентрации примесей на положение уровня Ферми в реальном полупроводнике

Аналогично, при $N_a > N_D$ происходит компенсация всей донорной примеси. Дырки в валентной зоне образуются за счет перехода электронов

на оставшиеся некомпенсированными $(N_a - N_D)$ акцепторные уровни. Такой полупроводник имеет p -тип проводимости и является частично компенсированным акцепторным. В принципе, возможна и полная компенсация примесей $N_D = N_a$. Такой полупроводник будет иметь концентрации электронов и дырок, равные собственным, и являться полностью компенсированным полупроводником. Все разобранные случаи схематично показаны на рис. 6.15.

Кроме рассмотренных случаев на практике встречаются следующие:

1. *Полупроводники, содержащие многовалентные примеси акцепторного или донорного типа.*

Для таких полупроводников концентрация электронов или дырок в соответствующих зонах определяется по уровням, сходным с уровнями для полупроводников с одновалентными примесями. Во внимание принимается энергия определенного уровня и его статистический вес в атоме примеси, например $p_z = g_z * N_V * e^{-\frac{E_z}{k*T}}$.

2. *Полупроводники, содержащие вакансии или дислокации.*
3. *Полупроводники, содержащие сложные дефекты, ассоциации точечных дефектов (примесь – примесь, примесь – вакансия).*

Статистика в таких полупроводниках разработана пока слабо.

4. *Сильнолегированные проводники.*

В отличие от собственных полупроводников, в которых проводимость осуществляется одновременно электронами и дырками, в примесных полупроводниках проводимость обусловлена, в основном, носителями одного знака: электронами в полупроводниках донорного типа и дырками в полупроводниках акцепторного типа. Эти носители основные.

Помимо них полупроводники содержат всегда и неосновные носители: донорный полупроводник – дырки, акцепторный полупроводник – электроны. Концентрация неосновных носителей значительно ниже концентрации основных носителей. Между ними существует взаимосвязь, определяемая законом действующих масс:

$$n_0 * p_0 = n_i^2, \text{ или } n_{n_0} * p_{n_0} = n_{p_0} * p_{p_0} = n_i^2, \quad (6.41)$$

где n_{n_0} – концентрация основных носителей в полупроводнике n -типа;

p_{n_0} – концентрация неосновных носителей в полупроводнике n -типа;

n_i – концентрация электронов или дырок в собственном полупроводнике.

ТЕМА 7. Неравновесные носители заряда в полупроводниках

7.1. Квазиуровни Ферми

При температуре, отличающейся от нуля, в полупроводнике происходит *тепловое* возбуждение (генерация) свободных носителей заряда. Если бы этот процесс был единственным, то концентрация носителей непрерывно возрастала бы с течением времени. Однако вместе с процессом генерации возникает процесс рекомбинации: электроны, перешедшие в зону проводимости или на акцепторные уровни, вновь возвращаются в валентную зону или на донорные уровни, что приводит к уменьшению концентрации свободных носителей. Между этими процессами при любой температуре устанавливается равновесие, которому соответствует равновесная концентрация носителей. Такие носители *называются равновесными*.

Помимо теплового возбуждения возможны и другие *способы генерации* свободных носителей в полупроводниках: под действием света, ионизирующих излучений, инжекции частиц через контакт. Действие таких агентов приводит к появлению дополнительных, избыточных против равновесной концентрации, свободных носителей. При генерации пар в полупроводнике с ярко выраженным тем или иным типом проводимости происходит значительное увеличение неосновных носителей – *инжекция неосновных носителей*.

При неизменной интенсивности внешнего воздействия концентрация неосновных носителей растет вначале быстро, а затем вследствие увеличивающейся скорости рекомбинации рост замедляется и, наконец, достигается *стационарное* состояние, при котором скорость генерации равна скорости рекомбинации носителей.

Пусть n – скорость генерации электронов и p – скорость генерации дырок. Концентрация *избыточных* или *неравновесных носителей* в этих условиях равна

$$\Delta n = n - n_0, \Delta p = p - p_0, \quad (7.1)$$

где n_0 , p_0 – концентрация равновесных носителей.

Равновесная концентрация электронов и дырок в полупроводнике однозначно определяется равновесным уровнем Ферми и температурой.

Для равновесных условий выполняется закон действующих масс: электроны и дырки, располагающиеся в зонах и на локальных уровнях, имеют единый уровень Ферми.

В неравновесных условиях концентрация электронов и дырок отлична от равновесной их концентрации. Из предыдущих формул имеем

$$n = n_0 + \Delta n, p = p_0 + \Delta p. \quad (7.2)$$

Для равновесных носителей не выполняется закон действующих масс $n * p \neq n_i^2$.

Электрон с энергией в 1эВ тратит избыточную энергию, испытывает примерно 10^3 столкновений, так как длина свободного пробега такого электрона $l \approx 100 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ м}$, а средняя тепловая скорость $10^5 \frac{\text{м}}{\text{с}}$, т.е. электрон за время 10^{-13} с растеряет избыточную энергию. Но время жизни электрона составляет $10^{-2} \dots 10^{-7} \text{ с}$. Поэтому избыточные носители большую часть времени своего существования в разрешенной зоне проводят в состоянии, когда их средняя энергия соответствует средней тепловой энергии решетки кристалла и, значит, их распределение по энергиям соответствует некоторому равновесному распределению. Это новое распределение должно характеризоваться другим значением энергии Ферми, отличным от исходного равновесного, т.е. *квазиуровнем Ферми*, так как концентрация этих носителей зарядов остается неравновесной.

$$f_{B(E)} = e^{\frac{\mu}{k*T}} * e^{\frac{-\Delta E_g}{k*T}}. \quad (7.3)$$

Итак, на какие бы уровни ни возбуждались электроны внешними агентами, внутри зоны проводимости весьма быстро (за время 10^{-13} с) устанавливается больцмановское равновесие по энергиям (7.3).

7.2. Рекомбинация носителей тока

Тип проводимости и концентрация основных носителей тока в примесном полупроводнике определяется концентрацией донорной или акцепторной легирующей примеси.

Концентрация неосновных носителей определяется динамическим равновесием процессов генерации электронно-дырочных ($\bar{e} - p$) пар и их исчезновения или рекомбинации.

Число электронно-дырочных пар, создаваемых в единицу времени в единице объема полупроводника, называется скоростью генерации.

Число электронно-дырочных пар, рекомбинирующих в единицу времени в единицу объема полупроводника, называется скоростью рекомбинации.

Генерация электронно-дырочных пар в условиях теплового равновесия происходит, в основном, за счет поглощения энергии колебания кристаллической решетки, т.е. поглощения фононов и поглощения равновесного теплового излучения, т.е. *фотонов*. Можно ускорить процессы генерации свободных носителей, например, освещая полупроводник или облучая его быстрыми частицами. В этом случае концентрации свободных носителей будут превышать равновесные. Одним из самых распространенных методов создания неравновесных носителей является *впрыскивание*, или *инжекция*, их через контакты или *p-n*-переходы.

При генерации носители получают энергию от внешнего воздействия. Естественно, что при рекомбинации они её выделяют. При этом необязательно, чтобы поглощенная, например, световая энергия выделялась в виде кванта света. *Именно по способу отвода энергии и производят классификацию механизмов рекомбинации.*

Имеется 2 вида рекомбинации:

- межзонная (зона-зона);
- рекомбинация через глубокие примесные уровни в запрещенной зоне полупроводника.

Наиболее вероятные механизмы рекомбинации:

- 1) *излучательная* (фотонная);
- 2) *безызлучательная* (фононная);
- 3) *ударная (эффект Оже)* – энергия, выделяемая при рекомбинации электронно-дырочной пары, передается какому-нибудь третьему носителю (электрону или дырке). Она затем теряется в столкновениях с дефектами решетки других носителей;
- 4) *плазменная* – когда энергия рекомбинации передается всему коллективу, так называемой электронно-дырочной плазме, переводя ее на более высокое по энергии квантовое состояние.

7.3. Межзонная рекомбинация

При межзонной рекомбинации происходит переход электрона из зоны проводимости непосредственно на свободный уровень (дырку) валентной зоны (рис.7.1). Освобождающаяся при этом энергия, равная примерно ширине запрещенной зоны, или выделяется в форме квантов электромагнитной энергии (фотонов), или превращается в энергию тепловых колебаний решетки (фононы), т.е. либо *излучательная*, либо *безызлучательная межзонные рекомбинации*.

До сих пор нет теории, описывающей количественно механизмы фононной межзонной рекомбинации. Сложность в том, что энергия, выделяемая в акте рекомбинации, не может быть унесена одним фононом, квантом тепловых колебаний решетки.

Энергия фононов составляет величину порядка сотых электрон-вольт, что значительно меньше ширины запрещенной зоны.

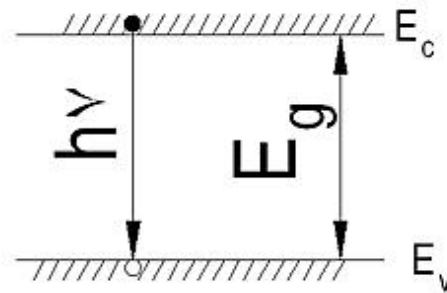


Рис. 7.1. Переход электрона из зоны проводимости в валентную зону при межзонной рекомбинации

В условиях *теплового равновесия* скорость межзонной рекомбинации R_0 должна быть пропорциональна концентрации электронов n_0 и дырок p_0 и равна скорости их генерации из валентной зоны:

$$R_0 = \gamma * n_0 * p_0 = \gamma * n_i^2 = g_0, \quad (7.4)$$

где γ – коэффициент рекомбинации (зависит от температуры),

$$\gamma = \frac{g_0}{n_i^2}. \quad (7.5)$$

Взаимодействуя между собой, электрон и дырка образуют связанные электрически нейтральные состояния, называемые *экситонами*.

Энергия фотонов, необходимая для *образования экситонов*, меньше ширины запрещенной зоны ΔE_g . Перемещаясь по кристаллу, *экситон* переносит энергию, но не переносит электрического заряда. Энергетический спектр экситонов имеет зонный характер. Они имеют

целый спин и являются бозонами (подчиняются статистике Бозе – Эйнштейна).

При наличии *дополнительной скорости генерации* стационарная концентрация электронов и дырок достигается тогда, когда скорость ре-

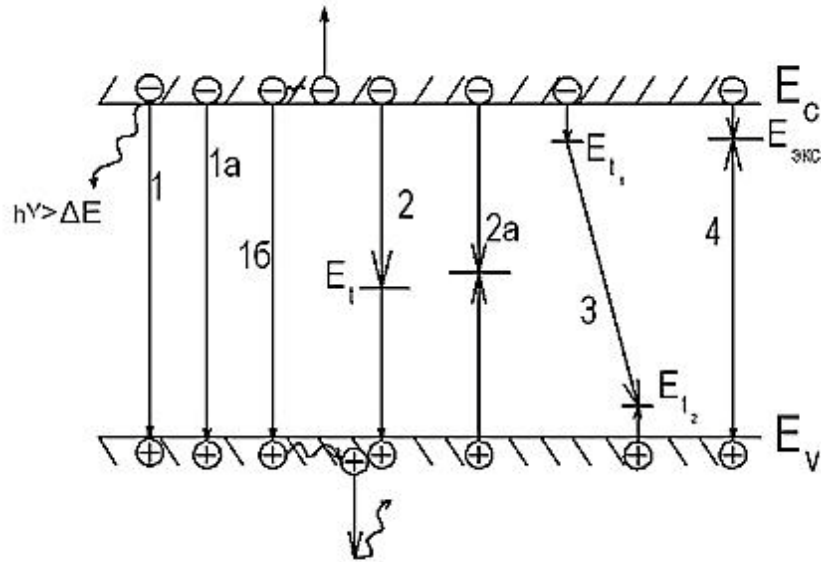


Рис. 7.2. Схема электронных переходов для различных механизмов рекомбинации: 1 – межзонная рекомбинация (фотонная, излучательная), 1a и 1б – рекомбинации Оже; 2 и 2a – примесная рекомбинация; 3 – рекомбинация с межпримесными переходами; 4 – экситонная рекомбинация электрона из зоны проводимости в валентную зону при межзонной рекомбинации

комбинации сравнивается со скоростью генерации электронно-дырочных пар g_0 :

$$g_0 + g = \gamma n p = \gamma (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) = R_0 + R, \quad (7.6)$$

где Δn и Δp – концентрации избыточных (неравновесных) носителей. Их можно выразить через скорости генерации, воспользовавшись соотношением (7.2):

$$g_0 + g = \frac{g_0}{n_i^2} (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) = \frac{g_0}{n_i^2} (n_0 p_0 + n_0 \Delta p + p_0 \Delta n + \Delta n \Delta p). \quad (7.7)$$

Для *низкого уровня возбуждения*, когда $\Delta n \Delta p \ll n_0 p_0$, последним членом в правой части уравнения можно пренебречь. Если учесть, что $\Delta n = \Delta p$, а $\Delta n \Delta p = n_i^2$ согласно закону действующих масс, то получим

$$\Delta n = \Delta p = \frac{g_* n_i^2}{g_0 * (n_0 + p_0)}. \quad (7.8)$$

Из (7.8) видно, что в этом случае концентрация избыточных носителей прямо пропорциональна скорости их генерации. Скорость рекомбинации этих носителей прямо пропорциональна их концентрации:

$$R = g = \frac{g_0 \cdot (n_0 + p_0)}{n_i^2} \Delta n. \quad (7.9)$$

Такая рекомбинация называется *линейной*.

Для *высокого уровня возбуждения* при $\Delta n \Delta p = \Delta n^2 \gg n_0 p_0$ последний член в выражении (7.7) становится преобладающим, и тогда

$$\Delta n = \Delta p = \sqrt{\frac{g \cdot n_i^2}{g_0}}. \quad (7.10)$$

Из (7.10) видно, что концентрация избыточных носителей пропорциональна корню квадратному из скорости генерации g . Замедление роста Δn и Δp при увеличении степени возбуждения связано, очевидно, с повышением темпа рекомбинации, пропорциональным произведению концентрации электронов и дырок.

Определим дополнительную скорость рекомбинации. Она пропорциональна квадрату концентрации избыточных носителей. Такая рекомбинация называется *квадратичной*:

$$R = g = \frac{g_0}{n_i^2} (\Delta n)^2. \quad (7.11)$$

Коэффициент пропорциональности между концентрацией избыточных носителей и скоростью их генерации называется *временем жизни неравновесных носителей тока* τ :

$$\Delta n = \tau_n g, \Delta p = \tau_p g. \quad (7.12)$$

Смысл этого названия заключается в следующем. Если между актом образования (генерации) избыточного носителя тока и его рекомбинацией проходит в среднем время τ , то за это время τ успевают в среднем прорекомбинировать все Δn (или Δp) избыточных носителей.

Следовательно, скорость рекомбинации неравновесных носителей R (т.е. число носителей, рекомбинирующих в единицу времени) равна $\frac{\Delta n}{\tau}$ (или $\frac{\Delta p}{\tau}$). А так как в стационарных условиях скорость генерации избыточных носителей равна скорости их рекомбинации, то мы получим отношение (7.12).

Найдем выражение для τ_n и τ_p при низком и высоком уровнях возбуждения (в случае зонной рекомбинации).

При низком уровне

$$\Delta n = \tau_n g \text{ из (7.12), } \Delta n = \Delta p = \frac{g * n_i^2}{g_0 * (n_0 + p_0)} \text{ из (7.8), } \tau_n g = \frac{g * n_i^2}{g_0 * (n_0 + p_0)}.$$

Тогда

$$\tau_n = \frac{n_i^2}{g_0 * (n_0 + p_0)}. \quad (7.13)$$

Итак, при *низком уровне возбуждения* время жизни избыточных носителей *не зависит от интенсивности возбуждения* и определяется степенью легирования полупроводника $(n_0 + p_0)$, убывая обратно пропорционально концентрации легирующей примеси.

Наибольшего значения время жизни достигает в собственном полупроводнике, для которого $n_0 = p_0 = n_i$. Подставив в (7.13), получим

$$\tau_{(i)} = \frac{n_i}{2 * g_0}. \quad (7.14)$$

При высоком уровне возбуждения

$$\text{из (7.10) } \Delta n = \Delta p = \sqrt{\frac{g * n_i^2}{g_0}}, \text{ из 7.12: } \Delta n = \tau_n g, \Delta p = \tau_p g,$$

$$\Delta n^2 = \Delta p^2 = \frac{g * n_i^2}{g_0},$$

$$g = \frac{g_0}{n_i^2} * (\Delta n)^2,$$

$$\Delta n = \tau_n g = \tau_n \frac{g_0}{n_i^2} (\Delta n)^2,$$

$$\tau_n = \frac{n_i^2}{g_0} \frac{\Delta n}{(\Delta n)^2} = \frac{n_i^2}{g_0} \frac{1}{\Delta n},$$

$$\tau_n = \tau_p = \frac{n_i^2}{g_0} * \frac{1}{\Delta n}. \quad (7.15)$$

При *квадратичной рекомбинации* время жизни неравновесных носителей *зависит от их концентрации*.

Во все формулы, описывающие скорость межзонной рекомбинации, входит параметр g_0 – скорость генерации электронно-дырочных пар в условиях теплового равновесия.

Установлено, что *скорость генерации* растет с уменьшением ширины запрещенной зоны и с увеличением температуры полупроводника.

В Ge и Si определяющую роль в рекомбинационных процессах играют примеси и другие дефекты структуры.

7.4. Рекомбинация через локальные уровни

Электрон из зоны проводимости сначала переходит на локальный уровень, а затем на свободный уровень в валентной зоне (рис. 7.3). Такая двухступенчатая рекомбинация более вероятна, чем рекомбинация электрона и дырки непосредственно через зону. Локальные уровни в полупроводнике играют роль посредников в рекомбинации электронов и дырок.

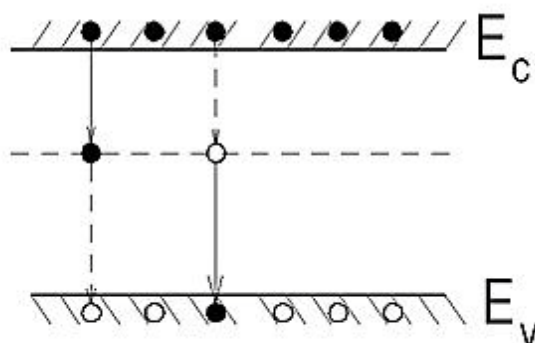


Рис. 7.3. Схема рекомбинации через локальные уровни

Такие уровни могут быть *эффективными уровнями рекомбинации*, если располагаются вдали от дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, но они могут играть в противном случае роль центров прилипания, так как захваченный на них носитель через некоторое время будет выброшен в свою зону.

Центры рекомбинации часто называют *ловушками*, а процесс перехода электрона из зоны проводимости на свободный уровень рекомбинации *захватом электрона ловушкой*.

Аналогично переход электрона с уровня ловушки на свободный уровень в валентной зоне, приводящий к исчезновению дырки в валентной зоне и освобождению уровня ловушки, называют *захватом дырки ловушкой*.

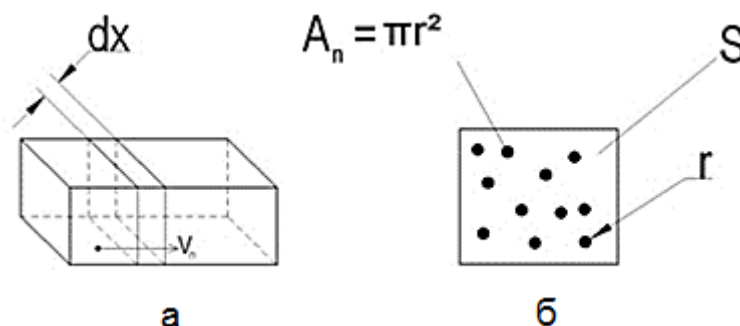


Рис. 7.4. К определению вероятности захвата электрона или дырки ловушкой: плоскопараллельный слой толщиной dx (а) и сечение этого слоя «на просвет» (б)

Определим вероятность захвата электрона и дырки ловушкой. Рассмотрим эти процессы более подробно. Выделим в полупроводнике плоскопараллельный слой толщиной dx , перпендикулярный направлению движения электрона (рис. 7.4, а).

Обозначим концентрацию ловушек через N_L . Каждую ловушку можно представить в виде сферы радиусом r , при попадании в которую электрон испытывает столкновение с ловушкой и захватывается.

Если посмотреть на выделенный слой «на просвет», то ловушки представляются в виде дисков площадью $A_n = \pi * r^2$ (рис. 7.4, б). Электрон, проходя через слой и попадая в один из дисков, будет захвачен ловушкой. Поэтому A_n называется сечением захвата электрона.

Обозначим через S площадь выделенного слоя. Объем его равен Sdx , число ловушек в нем $N_L Sdx$, где N_L – концентрация ловушек.

Суммарная площадь захвата равна

$$S_{\text{захв}} = A_n N_L S dx. \quad (7.16)$$

Вероятность столкновения электрона с ловушкой равна

$$W_n = \frac{S_{\text{захв}}}{S} = \frac{A_n * N_L * S * dx}{S} = A_n N_L dx. \quad (7.17)$$

Выразим dx через V_n (скорость электрона) и время, получим

$$W_n = A_n N_L V_n dt. \quad (7.18)$$

Поделив обе части выражения (7.18) на dt , получим вероятность захвата электрона ловушкой за единицу времени:

$$P_n = \frac{W_n}{dt} = A_n N_L V_n. \quad (7.19)$$

Аналогично можно получить выражение вероятности захвата дырки ловушкой в единицу времени:

$$P_p = A_p N_L V_p, \quad (7.20)$$

где A_p – сечение захвата дырки; V_p – средняя скорость дырки.

Полученные P_n и P_p – это вероятности захвата электрона и дырки ловушкой за единицу времени соответственно.

Следует иметь в виду, что N_L в (7.19) означает концентрацию пустых ловушек, а в (7.20) – концентрацию ловушек, занятых электронами, так как только на ловушки такого рода может идти захват электронов (на пустые) и дырок (на занятые электронами ловушки).

И еще, $A_n \neq A_p$, эти сечения обычно в пределах $10^{-17} \dots 10^{-25} \text{ м}^2$, а $V_n \neq V_p$ ввиду того, что $m_n^* \neq m_p^*$.

ТЕМА 8. Электропроводность твердых тел

В отсутствие электрического поля электронный газ в проводнике находится в равновесном состоянии и описывается равновесными функциями распределения.

Если мы рассматриваем *вырожденный газ*, то такой функцией является функция Ферми – Дирака (рис. 8.1, а), для *невырожденного газа* статистика Максвелла – Больцмана (рис. 8.1, б).

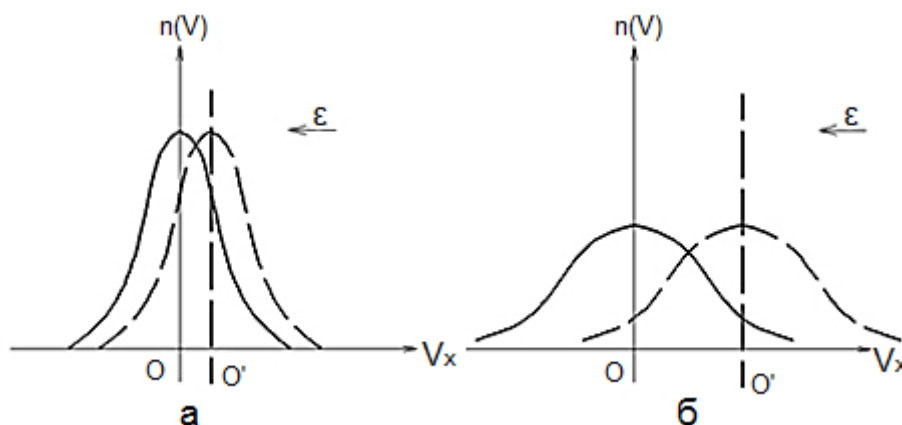


Рис. 8.1. Функции распределения: Ферми – Дирака, вырожденный электронный газ (а) и Максвелла – Больцмана, невырожденный электронный газ (б)

Если функции распределения представить в зависимости от скорости электрона, а не энергии, то кривые будут симметричны относительно оси ординат, что указывает на то, что число электронов, движущихся в противоположных направлениях, всегда одинаково, а их средняя скорость в любом направлении равна 0.

Этим объясняется отсутствие электрического тока в проводнике, содержащем сколько угодно свободных электронов, при отсутствии внешнего электрического поля.

8.1. Дрейф электронов под действием внешнего электрического поля

При приложении к проводнику электрического поля $\vec{\mathcal{E}}$ в нем возникает электрический ток, плотность которого по закону Ома пропорциональна $\vec{\mathcal{E}}$ (рис. 8.2):

$$\vec{j} = \sigma * \vec{\mathcal{E}}. \quad (8.1)$$

Коэффициент пропорциональности σ называется *удельной электропроводностью проводника*. Величина, равная $\rho = \frac{1}{\sigma}$, называется *удельным сопротивлением*.

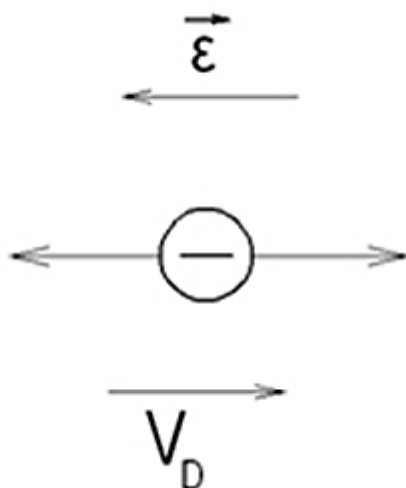


Рис. 8.2. Появление электрического тока в проводнике под воздействием внешнего электрического поля

Под действием поля \vec{E} электрон приобретает направление движения, так называемый *дрейф электрона*, со средней скоростью V_d .

Сила, действующая на электрон со стороны поля \vec{E} , равна $\vec{F} = -e * \vec{E}$. Если бы эта сила была единственной, то электрон должен был бы ускоряться и даже в полях низкой напряженности его скорость возрастала бы до сколько угодно большой величины.

Электропроводность такого проводника была бы $\sigma = \infty$, а удельное сопротивление $\rho = 0$.

Чем же обусловлено $\sigma \neq \infty$ и $\rho \neq 0$ в реальных проводниках?

Казалось бы, ответить на этот вопрос очень просто:

1) электрон движется не в пустоте, а в кристалле, который построен из ионов, имеющих конечные размеры;

2) электроны, ускоряемые полем, наталкиваются на ионы и тормозятся.

Но электрон не шарик, а скорее волна, делокализованная по всему кристаллу. Значит, дело не в столкновениях электронов-шариков с ионами-шариками. Появление определенного ρ обусловлено разного рода *дефектами*, искажающими идеальную структуру кристаллической решетки.

Это прежде всего:

- 1) *тепловые колебания решетки;*
- 2) *примесные атомы.*

Взаимодействие свободных электронов с этими дефектами приводит к их *рассеянию*, к *хаотизации* их движения и, как следствие этого, к конечности электрического сопротивления реальных кристаллов. Формально действия такого рассеяния можно свести к действию силы сопротивления, которую электрон испытывает при своем движении через решетку.

Принимая такую силу сопротивления пропорциональной ускорению (2-й закон Ньютона):

$$\vec{F}_{\text{сопр}} = -m_n^* * \frac{d\vec{V}_D}{dt} = -\frac{m_n^*}{\tau} * \vec{V}_D, \quad (8.2)$$

$\frac{1}{\tau}$ — коэффициент пропорциональности, $\frac{1}{\tau} = \frac{d}{d\tau}$;

уравнение движения электрона можно записать в виде

$$\vec{F} + \vec{F}_{\text{сопр}} = -e * \vec{\mathcal{E}} - \frac{1}{\tau} * m_n^* * \vec{V}_D. \quad (8.3)$$

Из (8.3) видно, что после включения электрического поля скорость направленного движения электронов будет возрастать, и они будут двигаться ускоренно до тех пор, пока сила сопротивления, пропорциональная скорости, не окажется равной силе \vec{F} , действующей со стороны поля. Начиная с этого момента направленное движение электронов будет совершаться с постоянной скоростью:

$$\vec{V}_D = -\frac{e * \vec{\mathcal{E}} * \tau}{m_n^*}. \quad (8.4)$$

Это и будет *скорость дрейфа*. Так как заряд электрона отрицателен, то дрейф происходит в направлении, противоположном $\vec{\mathcal{E}}$.

Величину отношения скорости дрейфа к напряженности поля называют *подвижностью носителей*:

$$U = \frac{V_D}{\mathcal{E}} = \frac{e * \tau}{m_n^*}. \quad (8.5)$$

Подвижность зависит от температуры:

$$U_{(T)} = U_0 * \left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{3}{2}}. \quad (8.6)$$

Подвижность — это дрейфовая скорость, приобретаемая электроном в поле единичной напряженности.

8.2. Удельная электропроводность проводника

Выясним физический смысл τ . После того, как скорость направленного движения электронов достигнет постоянного значения, то вследствие столкновения электронов с дефектами решетки эта скорость начнет неизбежно уменьшаться, и электронный газ будет переходить в равновесное состояние.

Такие процессы достижения равновесия в системе, ранее выведенной из этого состояния, называются релаксацией.

Полагая в (8.3), что $e * \varepsilon = 0$, получим уравнение, описывающее переход электронного газа в равновесное состояние, т.е. процесс его релаксации:

$$-\frac{dV_D}{dt} = -\frac{1}{\tau} * V_D. \quad (8.7)$$

Интегрируя (8.7), найдем

$$V_{D(t)} = V_D * e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (8.8)$$

где V_D – скорость дрейфа в момент выключения поля; $V_{D(t)}$ – по истечении времени t после выключения поля.

Из (8.8) следует, что τ определяет время установления в системе равновесного состояния: чем меньше τ , тем быстрее возбужденная система приходит в равновесие. За это время скорость направленного движения уменьшается в e раз. *Время τ называется максвелловым временем релаксации.*

Оценка показывает, что для таких металлов, как, например, медь, $\tau \approx 2 * 10^{-14}$ с, подвижность $U \approx 3 * 10^{-3} \frac{\text{м}^2}{\text{в} * \text{с}}$, скорость V_D в полях обычной напряженности ($\varepsilon \approx 10^{-2} \frac{\text{в}}{\text{м}}$) составляет $V_D \approx 0,3 * 10^{-4} \frac{\text{м}}{\text{с}}$. Эта величина на несколько порядков ниже скорости хаотического движения электронов $V \approx V_F \approx 1,6 * 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}$, вследствие чего с приложением поля средняя скорость электронов в проводнике остается практически неизменной.

Удобно пользоваться понятием *длины свободного пробега электрона*, равной произведению времени свободного пробега на скорость движения электронов V :

$$\lambda = V * \tau. \quad (8.9)$$

Для меди при $V = 1,6 * 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}}$ и $\tau = 2 * 10^{-14}$ с, свободный пробег $\lambda = 3,2 * 10^{-8}$ м, что примерно в 100 раз больше межатомных расстояний в решетке меди.

Поскольку в условиях теплового равновесия средняя скорость электрона в любом направлении равна 0, то ее можно не учитывать при вычислении электропроводности проводника, принимая во внимание только скорость дрейфа V_D :

$$\begin{aligned}\sigma &= n * e * U, \\ U &= \frac{e * \tau}{m_n}, \\ \tau &= \frac{\lambda}{V},\end{aligned}$$

тогда

$$\sigma = \frac{n * e^2}{m_n^*} * \tau = \frac{n * e^2}{m_n^*} * \frac{\lambda}{V}, \quad (8.10)$$

где n – концентрация электронного газа в проводнике; τ – время релаксации; V – скорость движения электронов; λ – длина свободного пробега.

8.3. Электропроводность невырожденного и вырожденного электронного газа

Невырожденный газ

В этом случае электроны являются полностью свободными в том смысле, что на движения любого из них другие не оказывают заметного влияния (электронов очень мало, и они практически никогда не встречаются так близко, чтобы их поведение могло ограничиваться принципом Паули). Поэтому все электроны проводимости принимают независимое друг от друга участие в создании электрического тока.

Учитывая это, в выражение для электропроводности невырожденного газа должно входить среднее время релаксации $\langle \tau \rangle$ всех свободных электронов, полученное путем усреднения τ по всему коллективу.

С учетом этого имеем выражение для подвижности электронов и удельной электропроводности невырожденного газа в виде

$$U = \frac{e}{m_n^*} * \langle \tau \rangle = \frac{e}{m_n^*} * \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle V \rangle}, \quad (8.11)$$

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2}{m_n^*} \cdot \langle \tau \rangle = \frac{n \cdot e^2}{m_n^*} \cdot \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle V \rangle}. \quad (8.12)$$

Здесь $\langle \lambda \rangle$ – средняя длина свободного пробега электронов; $\langle V \rangle$ – их средняя скорость.

Вырожденный газ

В таком газе основная масса электронов, энергия которых меньше энергии Ферми, не может принимать участия в процессах электропроводности, так как это связано с переходом на соседние, полностью заполненные уровни. Поэтому реагировать на внешнее поле могут только электроны, расположенные у уровня Ферми, так называемые *фермиевские электроны*.

В этом случае

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2}{m_n^*} \cdot \tau_F = \frac{n \cdot e^2}{m_n^*} \cdot \frac{\lambda_F}{V_F}, \quad (8.13)$$

где τ_F , λ_F , V_F – соответственно время свободного пробега, длина свободного пробега и скорость фермиевских электронов.

8.4. Температурная зависимость носителей заряда

Этот вопрос является одним из основных в теории электропроводности твердых тел.

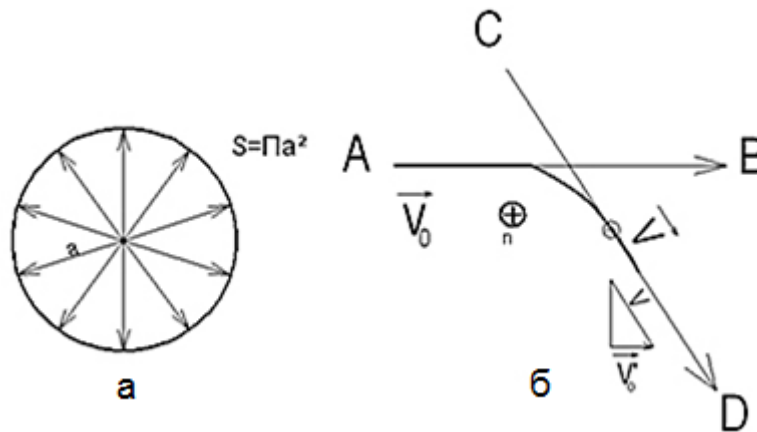


Рис. 8.3. Сечение рассеяния колеблющегося атома при высоких температурах (а), а также рассеяние электронов на примесных ионизированных атомах при низких температурах (б)

Область высоких температур. Основное значение имеет рассеяние электронов на тепловых колебаниях решетки (на фононах). Каждый атом решетки совершает беспорядочные колебания около положения равновесия (рис. 8.3, а), оставаясь в пределах сферы с радиусом, равным

амплитуде колебаний a . Площадь поперечного сечения этой сферы, равную $S = \pi * a^2$, можно принять за сечение рассеяния колеблющегося атома: электрон, проходя через проводник и попадая в одно из таких сечений, будет использовать рассеяния.

При прочих равных условиях вероятность попадания электрона в подобный диск будет, очевидно, пропорциональна площади диска S , а длина свободного пробега электрона – обратно пропорциональна этой S :

$$\lambda \sim \frac{1}{S} \sim \frac{1}{a^2}. \quad (8.14)$$

Энергия колеблющегося атома пропорциональна квадрату амплитуды колебаний: $E \sim a^2$.

С другой стороны, средняя энергия атомов, совершающих тепловые колебания в твердом теле, пропорциональна абсолютной температуре тела $E \sim T$. Поэтому в области высоких температур длина свободного пробега электрона, обусловленная рассеянием на фононах, должна быть обратно пропорциональна абсолютной температуре тела:

$$\lambda \sim \frac{1}{T}, V \sim \frac{1}{T^2}. \quad (8.15)$$

Если эти выражения подставить в формулу для подвижности электронов в случае невырожденного и вырожденного газа, то получим:

а) невырожденный газ: $U \sim \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle V \rangle} \sim \frac{T^{-1}}{T^{1/2}} \sim T^{-\frac{3}{2}};$

б) вырожденный газ: $U \sim \frac{\lambda_F}{V_F} \sim T^{-1}.$

В области высоких температур, в которой основное значение имеет рассеяние на тепловых колебаниях решетки, подвижность носителей невырожденного газа обратно пропорциональна $T^{\frac{3}{2}}$. Подвижность носителей вырожденного газа обратно пропорциональна T .

Область низких температур характеризуется рассеянием электронов на ионизированных примесных атомах. Рассеяние состоит в том, что ионы примеси отклоняют электроны, проходящие вблизи них, меняя направление скорости их движения (рис. 8.3, б).

Задача о рассеянии заряженных частиц заряженными центрами была впервые решена Резерфордом.

Для нашего случая формула имеет вид

$$\lambda \sim V^4 * \left(\frac{\varepsilon}{Z_e} \right)^2 * m_n^*, \quad (8.16)$$

где V – скорость электронов; ε – диэлектрическая постоянная кристалла; Z_e – заряд рассеивающего иона.

Качественно этот результат можно объяснить так: чем выше скорость носителей заряда, больше эффективная масса и сильнее ослабляется поле иона в кристалле, тем слабее отклоняются носители, тем больший путь им необходимо пройти, чтобы уничтожить движение в этом направлении. С увеличением заряда рассеивающего иона длина свободного пробега должна уменьшаться.

Итак, имеем:

а) для невырожденного газа: $U \sim \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle V \rangle} \sim \langle V \rangle^3 \sim T^{\frac{3}{2}}$;

б) для вырожденного газа: $U \sim \frac{\lambda_F}{V_F} \sim V_F^3 = \text{const.}$

Подвижность носителей заряда в области низких температур, обусловленная рассеянием на ионизированных примесях, пропорциональна для проводников с невырожденным газом и не зависит от t для проводников с вырожденным газом.



Рис. 8.4. Зависимость подвижности носителей заряда от температуры для невырожденного электронного газа

Из рис. 8.4 видно, что опыт в основном подтверждает теорию.

Рассмотрение процессов рассеяния электронов вырожденного газа в предельно чистых проводниках, содержащих ничтожное количество примесей, дает зависимость, представленную на рис. 8.5.

Можно выделить 3 участка кривой:

1. Область высоких температур, $U \sim T^{-1}$.
2. Область низких температур, $U \sim T^{-5}$.

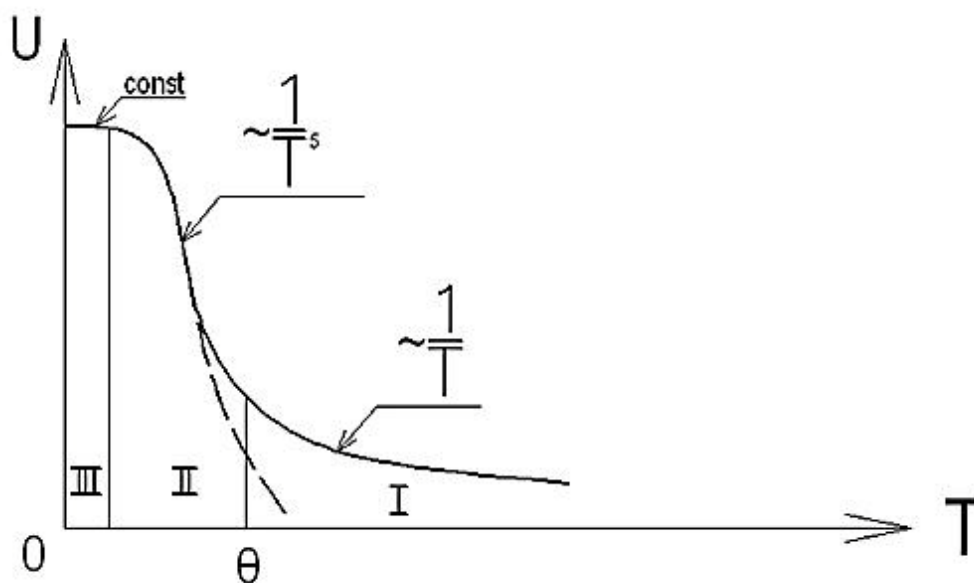


Рис. 8.5. Зависимость подвижности носителей заряда от температуры для предельно чистых металлов, электронный газ в которых вырожден

3. Область, примыкающая к абсолютному нулю, $U = \text{const}$ и не зависит от температуры.

θ – температура Дебая. Характеризует энергию фононов при некоторых допущениях:

- замене кристаллической решетки сплошной средой;
- пренебрежении различием в частотах колебаний (продольных и поперечных).

8.5. Электропроводность металлов

Электропроводность описывается соотношением $\sigma = n * e * U$ (n не зависит от t , U зависит от t); так как концентрация электронной проводимости в металле не зависит от температуры, то изменение $\sigma_{(T)}$ определяется исключительно изменением подвижности $U_{(T)}$.

Для области высоких температур

$$\sigma \sim T^{-1}, \quad (8.17)$$

$$\rho = \alpha * T, \quad (8.18)$$

где α – термический коэффициент сопротивления.

Для области низких температур

$$\sigma \sim T^{-5}. \quad (8.19)$$

$$\rho = \beta * T^5. \quad (8.20)$$

Для области, близкой к абсолютному нулю,

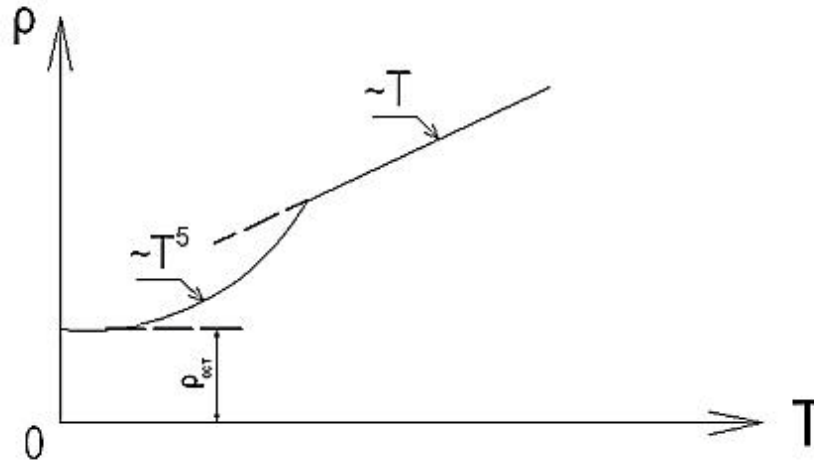


Рис. 8.6. Зависимость сопротивления от температуры для чистых металлов

$$\sigma = \text{const}. \quad (8.21)$$

$$\rho = \text{const} = \rho_0. \quad (8.22)$$

Сопротивление не исчезает и при 0К и называется *остаточным сопротивлением*. Оно обусловлено рассеянием электронов на примесях, всегда содержащихся даже в чистых металлах. На рис. 8.6 показана кривая зависимости сопротивления от температуры для чистых металлов.

8.6. Собственная проводимость полупроводников

Это проводимость, обусловленная наличием в полупроводнике собственных носителей заряда. Такая проводимость имеет место в полупроводниках высокой степени чистоты при не слишком низких температурах.

Удельная проводимость описывается соотношением

$$\sigma = n_i * e * U_n + p_i * e * U_p, \quad (8.23)$$

где n_i , p_i – концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике; U_n , U_p – их подвижность;

$$n_i = p_i = (N_v N_c)^{1/2} e^{\frac{-\Delta E_g}{2 * k * T}} = 2 \left(\frac{2\pi \sqrt{m_n^* m_p^*} k T}{h^3} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-\Delta E_g}{2 * k * T}}. \quad (8.24)$$

Подвижность носителей в области собственной проводимости определяется по формуле

$$U \sim \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle v \rangle} \approx T^{-\frac{3}{2}}. \quad (8.25)$$

Подставив все это выражение в (8.23), получим

$$\sigma_i = \sigma_0 * e^{\frac{-\Delta E_g}{2*k*T}}, \quad (8.26)$$

где σ_0 – предэкспоненциальный множитель в выражении для n .

Зависимость $\sigma_{i(T)}$ удобно представить в полулогарифмических координатах. Логарифмируя последнее выражение (8.26), получим

$$\ln \sigma_i = \ln \sigma_0 + \left(\frac{-\Delta E_g}{2*k*T} \right). \quad (8.27)$$

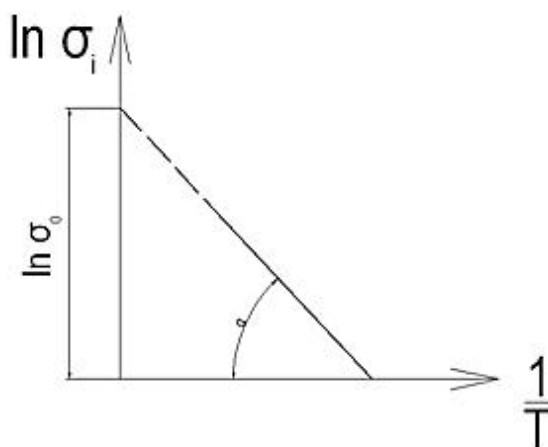


Рис. 8.7. Зависимость $\ln \sigma_i$ от $\frac{1}{T}$ для полупроводников

Если по оси абсцисс отложить $1/T$, а по оси ординат $\ln \sigma_i$, то получится прямая, отсекающая на оси ординат отрезок, равный $\ln \sigma_0$ (рис. 8.7). Тангенс угла наклона этой прямой к оси абсцисс пропорционален ΔE_g . Строя такой график, можно определить постоянную σ_0 и ширину запрещенной зоны ΔE_g .

В итоге, между полупроводниками и металлами существует принципиально важное различие. В то время как в *металлах концентрация носителей заряда практически не зависит от t* и температурная зависимость их проводимости целиком определяется температурной зависимостью подвижности носителей, в *полупроводниках*, наоборот, *концентрация носителей зависит от t* и проводимость практически полностью зависит от температурной зависимости концентрации носителей.

При данной t концентрация носителей заряда и проводимость собственных полупроводников определяются шириной их запрещенной зоны.

Но при наличии примесей картина зависимости проводимости полупроводника от температуры несколько видоизменяется.

8.7. Примесная проводимость в полупроводниках

На рис. 8.8 показаны схематические кривые зависимости $\ln \sigma$ для примесного полупроводника, содержащие различное количество примесей. На этих кривых можно выделить 3 характерные области I, II и III.

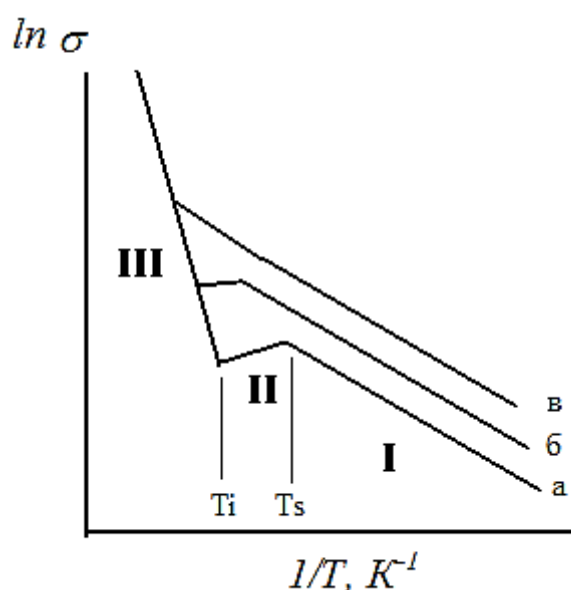


Рис. 8.8. Зависимость $\ln \sigma$ от $\frac{1}{T}$ для полупроводников с примесями

Область I соответствует низким температурам и простирается вверх до температуры истощения примеси T_s . На этом участке проводимость определяется по формуле

$$\sigma_n = \sigma_{n_0} * e^{\frac{-E_D}{2*k*T}}, \quad (8.28)$$

где E_D – энергия активации примеси; σ_{n_0} – коэффициент слабо зависящий от t . Логарифмируя, находим

$$\ln \sigma_n = \ln \sigma_{n_0} - \frac{E_D}{2*k*T}. \quad (8.29)$$

Строя график зависимости σ_n от T мы получим участок I под углом α_n к оси абсцисс, тангенс этого угла $tg \alpha_n = \frac{E_D}{2*k*T}$ пропорционален энергии ионизации примеси.

Таким образом, участок I отвечает примесной проводимости.

Область II простирается от температуры T_s до T_i .

В этой области все примесные атомы ионизированы, но ещё происходит заметное возбуждение собственных носителей, вследствие чего концентрация носителей сохраняется постоянной и равной концентрации примеси $n \approx n_D$.

Поэтому температурная зависимость σ_n полупроводника определяется в этой области температурной зависимостью подвижных носителей.

Если основным механизмом рассеяния носителей в этой области является рассеяние на фононах, для которого характерно уменьшение подвижности с возрастанием t , то проводимость будет падать (кривая *a*).

Если же основным механизмом рассеяния окажется рассеяние на ионизированных примесях, то проводимость будет возрастать с повышением t (кривая *в*).

В том случае, когда концентрация примеси достаточно велика, участок II может отсутствовать.

Область III соответствует переходу к собственной проводимости полупроводника:

$$\sigma \approx \sigma_i = \sigma_0 * e^{\frac{-\Delta E_g}{2*k*T}}. \quad (8.30)$$

С увеличением концентрации примесей угол α_n между кривой и осью абсцисс уменьшается. У вырожденных полупроводников, у которых n_i заряда почти не зависит от температуры, угол наклона этого участка определяется практически только зависимостью подвижности от температуры.

8.8. Эффект сильного поля

В полях, которые способны сообщать электронам на длине свободного пробега энергию, большую, чем та, которую они отдают решетке при рассеянии на дефектах, наблюдаются существенные отклонения от закона Ома. Скорость e под действием поля будет непрерывно увеличиваться, и электронный газ будет *разогреваться*. Такие поля называются *сильными*, а нижняя граница напряженности E_k , начиная с которой происходит разогревание электронного газа, называется *критическим полем*.

Влияние на подвижность

1. Если рассеяние идет на ионизированных примесях, то увеличение скорости носителей из-за их разогрева приводит к увеличению подвижности U и, следовательно, к увеличению электропроводности полупроводника $\sigma = \ln U$.

Плотность тока $i = eV_D n$ будет изменяться с напряжением *быстрее*, чем предполагается законом Ома.

2. Если же основным механизмом рассеяния является рассеяние на фононах (тепловые колебания решетки), то U и σ (подвижность и электропроводность) в сильных полях будут падать по мере разогрева газа, вследствие чего плотность тока будет изменяться с напряженностью *медленнее*, чем по закону Ома:

$$\sigma = n * e * U = \frac{e^2 * n * \tau}{m_n}, \quad (8.31)$$

$$i = \sigma * \varepsilon = \frac{e^2 * n * \tau * \varepsilon}{m_n} = e * V_D * n. \quad (8.32)$$

Так как $i = eV_D n$, то нелинейный характер тока в сильных полях свидетельствует о нелинейности скорости дрейфа V_D , так называемая *дрейфовая нелинейность*.

Влияние на концентрацию

Под действием сильных полей могут происходить изменения не только подвижности, но и *концентрации* носителей заряда. Существует несколько механизмов этого эффекта.

1. Ударная ионизация.

Если под действием поля при разогреве электронного газа e зоны приобретает энергию, достаточную для ионизации нейтральных атомов и переброски электронов в зону проводимости, и если при этом сами ионизирующие электроны остаются в зоне проводимости, то концентрация свободных носителей заряда будет лавинно возрастать до тех пор, пока этот процесс не окажется уравновешенным процессом рекомбинации. Такой процесс размножения свободных носителей называют *ударной ионизацией*.

2. Электростатическая ионизация.

Наблюдается в полях высокой напряженности за счет перехода e из валентной зоны в зону проводимости путем туннельного просачивания

через запрещенную зону. Этот эффект называется *эффектом Зинера* или *электростатической ионизацией*.

8.9. Эффект Ганна

Ранее было показано, что в сильных полях наблюдается явление дрейфовой нелинейности: скорость дрейфа носителей меняется непропорционально напряженности поля, что приводит к отклонениям от закона Ома.

Интересный эффект дрейфовой нелинейности был открыт Ганном в арсениде галлия. Он получил название *эффект Ганна*.

На рис 8.9 показана энергетическая структура зоны проводимости GaAs. В направлении [100] она имеет 2 минимума:

1) при $K=0$,

2) при $K=0,8k_0$, где k_0 – волновой вектор, отвечающий границе зоны Бриллюэна. Второй минимум располагается выше первого на расстоянии $\Delta E = 0,36$ эВ.

В нормальных условиях электроны зоны проводимости размещаются в одном минимуме и обладают эффективной массой $m_n^* = 0,072m_0$ и подвижностью $U_1 = 0,5 \frac{m^2}{B^2 \cdot c}$.

При приложении к кристаллу внешнего поля электроны приобретают дрейфовую скорость $V_D' = U_1 * \varepsilon$, растущую пропорционально E (соответствует участку ОА на рис. 8.10). Вследствие малой m_0 электроны сильно разогреваются. При 3 см^2 они приобретают энергию 0,36 эВ. Это происходит до тех пор, пока разогретые электроны не накопят энергию, достаточную для перехода в верхний минимум, где они обладают значительно большей эффективной массой $m_n'' = 1,3m_0$ и значительно меньшей подвижностью $U_2 = 0,1 \frac{m^2}{B^2 \cdot c}$.

Такой переход (на рисунке 8.9 он показан горизонтальной стрелкой) сопровождается резким уменьшением скорости дрейфа (из-за уменьшения подвижности электронов) и плотности тока i , т.е. появлением участка АВ на рис. 8.10, отвечающего отрицательной дифференциальной проводимости.

После перехода в верхний минимум подавляющего большинства электронов дальнейшее увеличение ε будет сопровождаться

пропорциональным ростом дрейфовой скорости $V_D'' = U_2 * \varepsilon$ и соответственно пропорциональным ростом тока i (участок BC на рис. 8.10)

Появление на ВАХ кристалла GaAs участка с отрицательной дифференциальной проводимостью позволяет конструировать на основе арсенида галлия полупроводниковые лазеры и многие другие удивительные квантовые приборы.

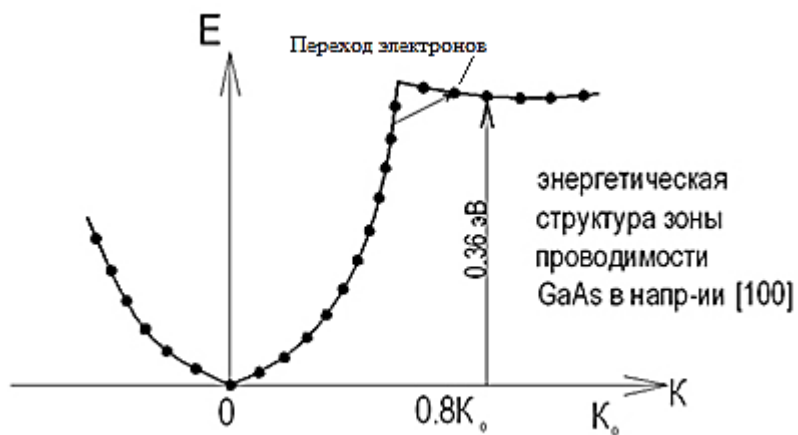


Рис. 8.9. Энергетическая структура зоны проводимости GaAs в направлении [100]

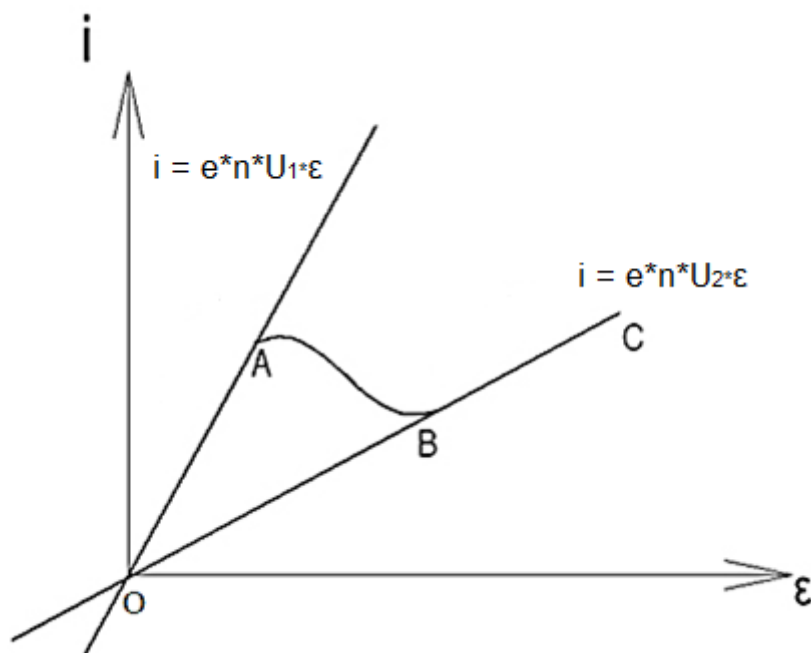


Рис. 8.10. Зависимость силы тока от напряженности внешнего электрического поля для арсенида галлия

ТЕМА 9. Явление сверхпроводимости

Это свойство многих проводников, состоящее в том, что их электрическое сопротивление скачком падает до 0 при охлаждении ниже определенной критической t , характерной для данного материала.

В 1911 г Камерлинг-Оннес, изучая поведение ртути при 415 К, обнаружил сверхпроводимость.

Более 100 элементов, соединений и сплавов обладают пределами $T_{кр}$ от десятых долей до 20 К.

Рассмотрим, чем отличается сверхпроводимость от проводимости веществ, свободных от примесных атомов и дефектов (рис. 9.1).

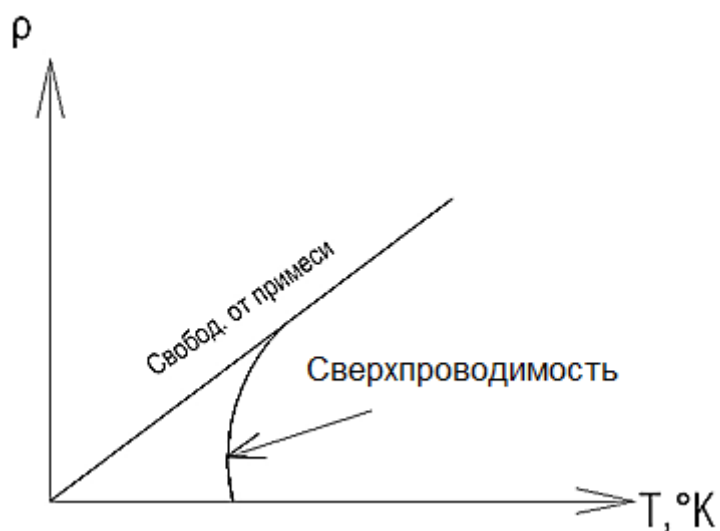


Рис. 9.1. Зависимость электрического сопротивления от температуры для веществ, свободных от примесей, и сверхпроводников

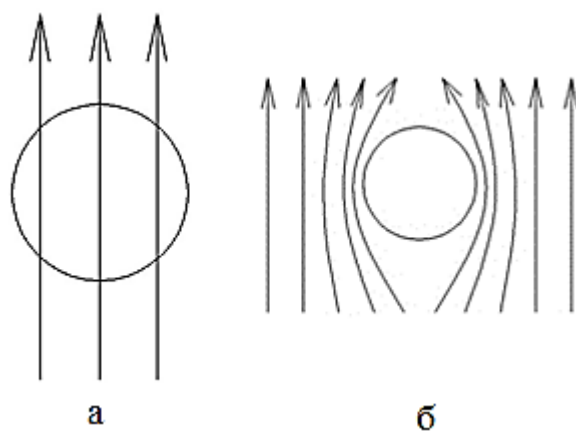


Рис. 9.2. Эффект Мейснера – Оксенфельда: линии внешнего магнитного поля по сечению обычного проводника (а) и сверхпроводника (б)

То, что происходит с внешним магнитным полем в сверхпроводнике, присуще идеальным диамагнетикам, обладающим нулевой магнитной проницаемостью, это так называемый эффект Мейснера – Оксенфельда (изображено на рис. 9.2). Наведенное магнитное поле как бы выталкивается сверхпроводником. Все это, естественно, имеет физическое объяснение, но оно слишком сложно, чтобы приводить его в данном пособии.

Явление сверхпроводимости и идеальный диамагнетизм были открыты в 1933 г. Однако природа сверхпроводимости до 1957 г не была ясна. В 1957 г Бардин, Купер и Шриффер создали микроскопическую теорию этого явления (БКШ-теория).

В основе БКШ-теории лежит представление о том, что между электронами проводимости металла могут действовать силы притяжения, возникающие вследствие поляризации кристаллической решетки.

Мы привыкли считать, что 2 электрона с одинаковым зарядом должны отталкиваться. Эта ситуация справедлива для электронов, находящихся в свободном пространстве. Однако в решетке электроны притягивают к себе положительно заряженные ионы, несколько сближая их и тем самым создавая вдоль пути своего движения избыточный положительный заряд поляризованной решетки, к которому могут быть притянуты другие электроны. Это эквивалентно возникновению силы притяжения между электронами, только действующей не непосредственно, а через поляризованную решетку (рис. 9.3).

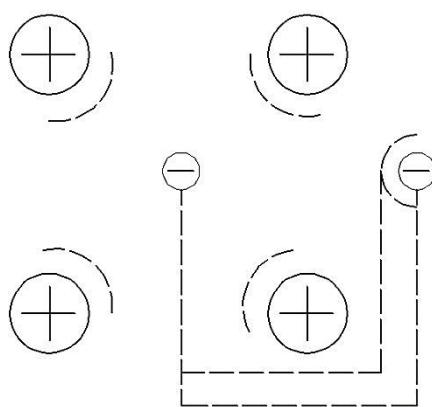


Рис. 9.3. Модель сверхпроводимости по БКШ: два электрона притягиваются и создают куперовскую пару через положительный ион решетки

С этой точки зрения сверхпроводимость следует ожидать прежде всего у тех металлов, у которых имеет место сильное взаимодействие

электронного газа с решеткой, приводящее в обычных условиях к относительно низкой электропроводности. Это, действительно, так.

Лучшими сверхпроводниками оказываются наиболее высокоомные металлы: свинец, ниобий, олово, ртуть. У таких высокопроводящих металлов, как Cu, Ag (где электронный газ в значительной степени свободный), сверхпроводимости не наблюдается.

Преобладание сил притяжения между электронами в решетке над силами отталкивания приводит к образованию из электронов электронных пар, которые называются *куперовскими парами*. Купер впервые показал, что образование таких пар является энергетически выгодным.

При этом наибольший выигрыш в энергии возникает при связывании в пары электронов, обладающих противоположными спинами, равными по величине и противоположными по направлению импульсами, т.е. при образовании пары с нулевым полным импульсом.

Поскольку силы притяжения электронов в куперовских парах относительно слабые, то они «не сминаются», а находятся на достаточном расстоянии друг от друга (10^{-6}) и оно определяет размер пары.

Пространственное перекрытие огромного количества пар, находящихся в объеме, неизбежно должно привести к взаимной корреляции их движения. Пары не могут двигаться независимо друг от друга, как электроны в нормальном металле. Каждая пара, взаимодействуя со всеми остальными, должна двигаться строго согласованно, и любое нарушение в движении данной пары должно сказываться на свойствах совокупности пар. Из *теории БКШ* следует, что подобная полная корреляция достигается тогда, когда центры масс всех пар движутся с *одинаковым импульсом*. При такой импульсной упорядоченности пары образуют единый коллектив, или, как говорят, *конденсат*, вырвать из которого отдельную пару тем труднее, чем больше их находится в этом коллективе.

Все ли электроны могут объединяться в пары?

Нет, не все, а только те, которые могут возбуждаться и изменять свое состояние. Такими являются *фермиевские электроны*, ответственные за электропроводность металла. Они составляют 10^{-4} от общего числа электронов проводимости металла.

Чем является куперовская пара, фермионом или бозоном?

Обладая нулевым спином, т.е. являясь бозе-частицами, куперовские пары размещаются на одном уровне, расположенном ниже уровня Ферми в нормальном металле на расстоянии $\Delta = \frac{E_{\text{св}}}{2}$ от него. Здесь $E_{\text{св}}$ – энергия связи электрона в паре. Поэтому для перевода электрона из сверхпроводящего в нормальное состояние необходимо затратить энергию $E_{\text{св}} = 2 * \Delta$ на разрыв пары или $\Delta = \frac{E_{\text{св}}}{2}$ на каждый электрон.

Это означает, что нормальное состояние электронов в сверхпроводнике отделено от сверхпроводящего состояния энергетической щелью $E_{\text{св}}$, напоминающей запрещенную зону полупроводника (рис. 9.4).

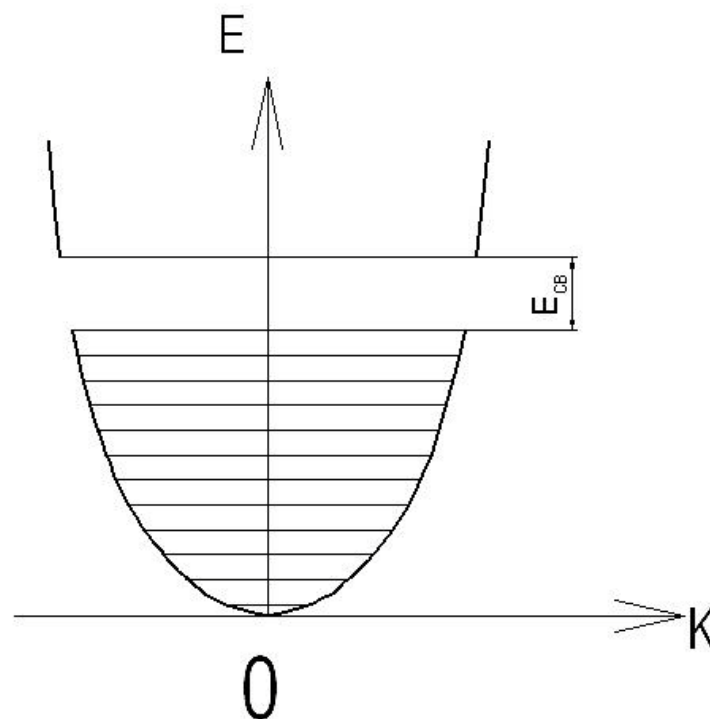


Рис. 9.4. «Энергетическая щель» между нормальными и сверхпроводящими состояниями в сверхпроводнике

Рассмотрим поведение куперовских пар при возбуждении в проводнике электрического тока. В отсутствие тока все пары вследствие полной корреляции имеют импульс, равный 0, так как они образованы электронами, имеющими равные по величине и противоположные по направлению импульсы.

Возникновение тока не нарушает корреляции пар: под действием внешнего источника, вызвавшего ток, все они приобретают один и тот же импульс и движутся как единый коллектив в одном и том же направлении с некоторой дрейфовой скоростью. При этом поведение пар в металле

существенно отличается от поведения обычных электронов, совершающих направленное движение. Нормальные электроны испытывают рассеяния на тепловых колебаниях и других дефектах решетки, что приводит к хаотизации их движения.

Куперовские пары, пока они не разорваны, рассеиваться на дефектах решетки не могут, так как выход любой пары из строго коррелированного коллектива маловероятен. Пару можно вырвать из конденсата, лишь разрушив ее, однако при очень низких температурах число фононов, обладающих достаточной для этого энергией, достаточно мало.

Не испытывая рассеяния на своем пути, пары обуславливают появление сверхпроводящего тока, текущего через сверхпроводник без сопротивления.

Что будет с ростом температуры?

Ввиду того, что связь в куперовских парах слабая, совершенный конденсат, охватывающий все электроны, способные объединяться в пары, может существовать лишь при абсолютном 0.

С ростом температуры в кристалле появляется всё больше фононов, способных разрушать пары и переводить электроны в нормальное состояние. Нормальные электроны, взаимодействуя с парами, нарушают их импульсную упорядоченность и ослабляют корреляционную связь в конденсате, т.е. уменьшают ширину энергетической щели $E_{\text{св}}$ (рис. 9.4).

При $T = T_{\text{кр}}$ щель сужается до 0 и сверхпроводимость нарушается, т.е. все электроны становятся нормальными.

Теория БКШ дает следующее выражение для $T_{\text{кр}}$:

$$T_{\text{кр}} = \theta * \exp\left(-\frac{1}{g}\right), \quad (9.1)$$

где θ – температура Дебая для материала проводника; g – параметр пропорциональной энергии электронов пары.

Из формулы видно, что чем больше θ , тем выше $T_{\text{кр}}$.

У обычных сверхпроводников $g \sim \frac{1}{2}$, $\theta = 100 \dots 500 \text{ K}$, тогда $T_{\text{кр}} \approx 20 \dots 23 \text{ K}$. Самый высокотемпературный сверхпроводник имеет в настоящее время $T_{\text{кр}} = 20 \text{ K}$. Это сплав $(\text{Nb}_3\text{Al})_4 + (\text{Nb}_3\text{Ge})$.

Теоретические и экспериментальные работы по сверхпроводимости, которые ведутся во всем мире, преследуют следующие цели:

- 1) разработку новых сверхпроводящих материалов с более высокой $T_{\text{кр}}$;

- 2) изыскание новых, более эффективных видов взаимодействия электронов, способных привести к их объединению в пары с более высокой энергией связи и более высоким параметром g .

Возможно, на этом пути удастся получить высокотемпературную сверхпроводимость, практическую значимость которой трудно переоценить.

Сверхпроводимость в проводнике можно разрушить:

- увеличив в нем плотность тока выше критического значения $j_{кр}$, при которой энергия пары достигает величины, достаточной для ее разрушения;
- магнитным полем.

При помещении проводника в поле \vec{B} в поверхностном слое наводится незатухающий ток, создающий в объеме проводника поле $\vec{B}_{Вн}$, направленное противоположно \vec{B} и компенсирующее его. При росте \vec{B} увеличивается плотность тока в сверхпроводнике и компенсирующее поле $B_{Вн}$.

При некотором значении $B_{кр}$, называемом критическим полем, наведенный в проводнике ток достигает критической величины и сверхпроводимость нарушается. При повышении t проводника $B_{кр}$ уменьшается.

Согласно теории БКШ это понижение t описывается соотношением

$$B_{кр(T)} = B_{кр(0)} * \left[1 - \left(\frac{T}{T_{кр}} \right) \right]. \quad (9.2)$$

Незатухающие токи, наведенные в сверхпроводнике в магнитном поле, текут по поверхности в слое толщиной $\lambda \approx 10 \dots 100$ нм. На эту глубину внешнее магнитное поле проникает в сверхпроводнике, быстро убывая с расстоянием X от поверхности:

$$B_{(x)} = B_{(0)} * e^{xe \left(-\frac{x}{\lambda} \right)}, \quad (9.3)$$

где $B_{(0)}$ – индукция поля у поверхности; λ – глубина проникновения (зависит от t и материала проводника).

В тонких пленках толщиной менее λ величина критического поля $B_{кр}$ на порядок больше, чем в массивном теле. Тем не менее существование $j_{кр}$ и $B_{кр}$ заметно ограничивает возможность практического применения сверхпроводников.

Существенный прогресс в этой области был достигнут, когда были получены так называемые сверхпроводники II рода, к которым относятся многие сплавы и некоторые однородные сверхпроводники.

Теория сверхпроводников II рода была разработана советскими учеными Абрикосовым и Горюковым в 1957-1959 гг. В этих материалах возникающие во внешнем магнитном поле сверхпроводящие токи текут не только по поверхности, но и в толще проводника.

В настоящее время получены сверхпроводники II рода с критическим полем более 200 тыс. Гс (гаусс), в то время как у сверхпроводников I рода оно не превышает 1000 Гс.

Библиографический список

1. Петрович В.П. Физические основы электроники. Учебное пособие. – Томск: Изд. ТПУ. 2000. – 152с.
2. Виноградов Ю.В. Основы электронной и полупроводниковой техники. – М: Энергия, 1968. – 624с.
3. Жеребцов И.П. Основы электроники. – Л: Энергия, 1974. – 463с.
4. Харченко В.М. Основы электроники. – М: Энергоиздат, 1982. – 353с.
5. В. В. Горбачев, Л. Г. Спицына. Физика полупроводников и металлов. М.: «Металлургия», 1976. – 336с.
6. П. И. Баранский, В. П. Клочкин, И.В. Поплывкевич. Полупроводниковая электроника. Справочник. Киев: «Наукова Думка», 1975. – 704с.
7. Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. М.: «Мир», 1974. – 478с.
8. Я. А. Федотов. Основы физики полупроводниковых приборов. М.: «Советское радио», 1976. – 590с.
9. Р. Кристи, А. Питти. Строение вещества: введение в современную физику. М.: «Наука», 1969. – 595с.
10. Физическое металловедение, Том I, под редакцией Р. Кана. М.: «Мир», 1976. – 329с.
11. Р. Нанавати. Введение в полупроводниковую электронику. М.: «Связь», 1965. – 465с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ.....	3
ТЕМА 1. Кристаллическая решетка	4
1.1. Равновесное расположение частиц в кристаллах	4
1.2. Трансляционная решетка Бравэ	5
1.3. Обозначение узлов, направлений и плоскостей в кристалле.....	7
ТЕМА 2. Классификация кристаллов по типу связей	11
2.1. Ионные кристаллы	11
2.2. Атомные кристаллы	13
2.3. Металлические кристаллы.....	15
2.4. Молекулярные кристаллы	15
ТЕМА 3. Дефекты в реальных кристаллах	17
3.1. Точечные дефекты.....	17
3.2. Линейные дефекты	21
3.3. Поверхностные дефекты.....	22
ТЕМА 4. Зонная теория твердого тела.....	23
4.1. Энергетические уровни свободных атомов.....	23
4.2. Коллективизация электронов в кристалле.....	29
4.3. Превращение энергетических уровней свободных электронов в энергетические зоны в кристалле	32
4.4. Движение электрона в периодическом поле кристалла	35
4.5. Понятие об эффективной массе электрона.....	40
ТЕМА 5. Полупроводники с точки зрения зонной теории	43
5.1. Заполнение зон электронами.....	43
5.2. Собственные полупроводники.....	46
5.3. Понятие о «дырках»	48
5.4. Примесные уровни в полупроводниках	49
5.5. Уровни прилипания.....	52
ТЕМА 6. Статистика носителей зарядов в кристалле	55
6.1. Функция распределения и полная функция распределения электронов по состояниям	55
6.2. Вырожденные и невырожденные коллективы	58

6.3. Функция распределения Ферми – Дирака.....	59
6.4. Статистика Максвелла – Больцмана и невырожденный электронный газ	63
6.5. Невырожденные полупроводники.....	64
6.6. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в собственных полупроводниках.....	66
6.7. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в примесных невырожденных полупроводниках дырочного типа (так называемые доноры однозарядные)	67
6.8. Положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в примесных полупроводниках акцепторного типа	70
6.9. Реальные полупроводники, содержащие донорную и акцепторную примеси.....	72
ТЕМА 7. Неравновесные носители заряда в полупроводниках	74
7.1. Квазиуровни Ферми	74
7.2. Рекомбинация носителей тока	75
7.3. Межзонная рекомбинация	77
7.4. Рекомбинация через локальные уровни.....	81
ТЕМА 8. Электропроводность твердых тел	84
8.1. Дрейф электронов под действием внешнего электрического поля ...	84
8.2. Удельная электропроводность проводника.....	87
8.3. Электропроводность невырожденного и вырожденного электронного газа	88
8.4. Температурная зависимость носителей заряда	89
8.5. Электропроводность металлов.....	92
8.6. Собственная проводимость полупроводников.....	93
8.7. Примесная проводимость в полупроводниках.....	95
8.8. Эффект сильного поля	96
8.9. Эффект Ганна.....	98
ТЕМА 9. Явление сверхпроводимости	100
Библиографический список.....	106

Учебное издание

Огородников Алексей Игоревич

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

Редактор *И.Г. Южакова*
Компьютерная верстка *А.И. Огородникова*

Подписано в печать	21.03.2011 г.	Формат 60x84 1/16
Бумага 80 гр/м ²	Плоская печать	Усл. печ. л. 6,15
Уч.-изд. л. 5,8	Тираж 50 экз.	Заказ

Редакционно-издательский отдел УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19
rio@mail.ustu.ru

Отпечатано в отделении полиграфии ИВТОБ УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира 19
Тел. (343) 375-41-33

ISBN 978-5-321-01917-7



9 785321 019177